Ejemplo Práctico: Aplicación del Método de Newton-Raphson

Regresión No Lineal

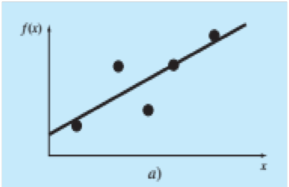
Rafael Vargas

Cátedra de Cálculo Numérico: UAP-ISI

22 de abril de 2020

Teoría Básica de Regresión: Problema en Una Variable

Dado el caso donde se analizan los datos de un cierto experimento. El experimento consiste en modificar una cierta una cierta variable *X*, llamada explicativa, y observar la respuesta del sistema a través de la medición de la variable *Y*, llamada variable explicada. A través del experimento se reúnen los valores correspondientes de Y para cada valor de *X*.
El problema de Regresión consiste entonces en hallar una función *y=f(x)* que ajuste aproximadamente los datos relevados en forma experimental.



Tipos de Regresión: Regresión Lineal

Es el caso donde la función de ajuste, $y = f(x, P)$, puede escribirse como la combinación lineal de un conjunto de funciones que solamente dependen de x, y un conjunto de parámetros P que terminan de definir la función:

- Por ejemplo, supongamos el siguiente conjunto de funciones: $g_1(x)$, $g_2(x)$ y $g_3(x)$
- A su vez, se encuentran definidos un conjunto de parámetros: $P = \{a_1, a_2, a_3\}$.
- Entonces, la función de ajuste se podría escribir como:

$$y = f(x, a_1, a_2, a_3) = a_1 * g_1(x) + a_2 * g_2(x) + a_3 * g_3(x)$$

- Luego el problema de Regresión Lineal consiste en encontrar el mejor conjunto de parámetros P para ajustar el conjunto de datos experimentales.

Tipos de Regresión: Regresión No Lineal

Este es el caso más general. En el cual, la función de ajuste *NO* se puede escribir como una combinación lineal de funciones que solo dependan de x.
- Algunos ejemplos son:

$$y = f(x, a_1, a_2) = a_1 * a_2 * x$$

$$y = f(x, a_1, a_2) = a_1 * \cos(a_2 * x)$$

$$y = f(x, a_1, a_2) = a_1 * e^{-\frac{a_2}{x}}$$

Teoría Básica de Regresión: Método de los Mínimos Cuadrados

El método por defecto para realizar el ajuste de funciones es el Método de los Mínimos Cuadrados. El mismo consiste en buscar el conjunto de parámetros que definen la función de ajuste, de manera que se minimice el valor dado por la formula siguiente:

$$S_{ec} = \sum_{i=1}^{n} e_i^2$$

Donde $e_i$es el error en la predicción del valor $y_{i,medida}$. La cual se calcula como:

$$e_i = y_{i,medida} - y_{i,modelo}$$

Teoría Básica de Regresión: Método de los Mínimos Cuadrados (cont.)

Para realizar el calculo del valores de y predicho por el modelo se utiliza la siguiente: ecuación:

$$y_{i,modelo} = f\left(x_{i,medida}, P\right)$$

Si observamos del lado derecho de la ecuación podemos ver que las únicas incógnitas es el conjunto de valores que tomarán los parámetros. Ya que $x_{i,medida}$constituye el conjunto de valores medidos experimentalmente, por lo que son valores conocidos. Luego, reemplazando esto en la primera formula se obtiene:

$$S_{ec}\left(P\right) = \sum_{i=1}^{n}\left(y_{i,medida} - f\left(x_{i,medida}, P\right)\right)^2$$

Donde se observa que la Suma de los Errores al Cuadrado (S_{ec}) solo depende del conjunto de parámetros P.

Método de los Mínimos Cuadrados: Enfoques de Resolución

Desde un punto de vista general, existen dos enfoques que se pueden seguir para resolver el problema de minimización asociado al Método de los Mínimos Cuadrados (MMC):
1) Métodos basados en sistemas de ecuaciones
2) Métodos basados en búsqueda por gradiente descendente

Método de los Mínimos Cuadrados: Métodos basados en Sistemas de Ecuaciones

El problema de minimización asociado al MMC puede plantearse de la siguiente manera:

$$\underset{P \in \mathbb{R}^n}{Mín} \quad S_{ec}(P)$$

Es decir encontrar el conjunto de valores reales de los parámetros $P = \{a_1, a_2, ..., a_n\}$, que hagan mínimo la suma de errores al cuadrado.
Partiendo de la condición de que toda función continua y derivable tendrá un gradiente «nulo» cuando las variables independientes (en este caso $a_1, a_2, ..., a_n$) se ubiquen en un mínimo local. Esto se representa por la ecuación:

$$\nabla(S_{ec}(P)) = \mathbf{0}$$

Método de los Mínimos Cuadrados: Métodos basados en Sistemas de Ecuaciones (cont.)

Esto es equivalente a escribir un conjunto de n ecuaciones y n incógnitas como el siguiente:

$$\frac{\partial S_{ec}}{\partial a_1} = 0$$
$$\frac{\partial S_{ec}}{\partial a_2} = 0$$
$$\vdots$$
$$\frac{\partial S_{ec}}{\partial a_n} = 0$$

Dicho sistema puede ser resuelto tanto de forma analítica como de forma numérica.

Ejemplo MMC mediante Sistemas de Ecuaciones: Modelo No Lineal

Un investigador reporta los datos tabulados a continuación, de un experimento para determinar la tasa de crecimiento de bacterias k (por día), como función de la concentración de oxígeno c (mg/L). Se sabe que dichos datos pueden modelarse por medio de la ecuación siguiente:

$$k = \frac{k_{max} * c}{c_s + c}$$

Donde c_s y $k_{máx}$ son los parámetros del modelo no lineal.
Los datos del experimento se encuentran tabulados y se muestran a continuación:

c	0.5	0.8	1.5	2.5	4.0
k	1.1	2.4	5.3	7.6	8.9

Ejemplo MMC mediante Sistemas de Ecuaciones: Función a Minimizar

La función a minimizar es la Sumatoria de los Errores al Cuadrado. Por lo que en primer lugar desarrollamos el cálculo del error.

$$e_i = k_i - \frac{k_{max} * c_i}{c_s + c_1} \qquad \forall i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$$

Esta ecuación indica la forma de calcular el error del modelo para cada una de los 5 pares de valores experimentales (c_i, k_i).
Entonces la función a minimizar sería la siguiente:

$$S_{ec}\left(k_{máx}, c_s\right) = \sum_{i=1}^{5} \left(k_i - \frac{k_{max} * c_i}{c_s + c_i}\right)^2$$

Ejemplo MMC mediante Sistemas de Ecuaciones: Derivadas

Con la ayuda de un Sistema de Álgebra Computacional (CAS), desarrollamos las formulas de las derivadas parciales de la función $S_{ec}\left(k_{máx}, c_s\right)$ respecto de los 2 parámetros, $k_{máx}$ y c_s.

$$\frac{\partial}{\partial k_{max}} S_{ec}\left(k_{max}, c_s\right) = \sum_{i=1}^{5} \frac{2 c_i \left(\frac{c_i k_{max}}{c_s + c_i} - k_i\right)}{c_s + c_i}$$

$$\frac{\partial}{\partial c_s} S_{ec}\left(k_{max}, c_s\right) = \sum_{i=1}^{5} \frac{2 c_i k_{max} \left(k_i - \frac{c_i k_{max}}{c_s + c_i}\right)}{\left(c_s + c_i\right)^2}$$

Ejemplo MMC mediante Sistemas de Ecuaciones: Ecuaciones

El sistema de ecuaciones ahora lo armamos haciendo las derivadas parciales iguales a cero:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{5} \frac{2c_i\left(\frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i} - k_i\right)}{c_s+c_i} = 0 \\ \sum_{i=1}^{5} \frac{2c_i k_{max}\left(k_i - \frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i}\right)}{(c_s+c_i)^2} = 0 \end{cases}$$

El lado izquierdo de las ecuaciones las llamaremos $f_1\left(k_{máx}, c_s\right)$ y $f_2\left(k_{máx}, c_s\right)$, por simplicidad.

Ejemplo MMC mediante Sistemas de Ecuaciones: Formulación Matricial del Método de Newton-Raphson

El siguiente paso para formular la implementación del Método de Newton-Raphson es definir la Función Vectorial y su Jacobiano:

$$F\left(k_{max}, c_s\right) = \begin{bmatrix} f_1\left(k_{max}, c_s\right) \\ f_2\left(k_{max}, c_s\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{5} \frac{2c_i\left(\frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i} - k_i\right)}{c_s+c_i} = 0 \\ \sum_{i=1}^{5} \frac{2c_i k_{max}\left(k_i - \frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i}\right)}{\left(c_s+c_i\right)^2} = 0 \end{bmatrix}$$

$$J\left(k_{max}, c_s\right) = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{5}\left(\frac{2{c_i}^2}{\left(c_s+c_i\right)^2}\right) & \sum_{i=1}^{5}\left(\frac{2c_i\left(k_i - \frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i}\right)}{\left(c_s+c_i\right)^2} - \frac{2{c_i}^2 k_{max}}{\left(c_s+c_i\right)^3}\right) \\ \sum_{i=1}^{5}\left(\frac{2c_i\left(k_i - \frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i}\right)}{\left(c_s+c_i\right)^2} - \frac{2{c_i}^2 k_{max}}{\left(c_s+c_i\right)^3}\right) & \sum_{i=1}^{5}\left(\frac{2{c_i}^2 {k_{max}}^2}{\left(c_s+c_i\right)^4} - \frac{4c_i k_{max}\left(k_i - \frac{c_i k_{max}}{c_s+c_i}\right)}{\left(c_s+c_i\right)^3}\right) \end{bmatrix}$$

Con esto, se tienen todos los datos necesarios para implementar el método de Newton-Raphson y resolver el problema de ajuste por MMC del modelo NL.