Tarea 20 - Ajuste lineal y cuadrático

Isaac Rodríguez Bribiesca

1. Simplificación mínimos cuadrados

Sean x_i, y_i, con $i = 1, 2, ..., n$, parejas de puntos que se quieren ajustar por medio de mínimos cuadrados, usando ya sea un modelo lineal $y = mx + b$ o un modelo cuadrático $y = ax^2 + bx + c$. A continuación se muestra la simplificación de los sistemas de ecuaciones.

1.1. Simplificación modelo lineal

Como se vió en clase, al calcular las derivadas parciales de la función de error $E(x)$ respecto a los parámetros del modelo m y b, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\sum_{i=1}^{n}(mx_i + b)x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i$$
$$\sum_{i=1}^{n}(mx_i + b) = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

Desarrollando el lado izquierdo de ambas ecuaciones:

$$(\sum_{i=1}^{n} x_i^2)m + (\sum_{i=1}^{n} x_i)b = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i$$
$$(\sum_{i=1}^{n} x_i)m + (\sum_{i=1}^{n} 1)b = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

Reescribiendo el sistema en términos de matrices:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{pmatrix} \tag{1}$$

Con lo que sólo se tendrá que resolver dicho sistema de 2×2, para obtener los parámetros m y b del modelo.

1.2. Simplificación modelo cuadrático

En el caso del modelo cuadrático, $y = ax^2 + bx + c$, debido a que se tienen 3 parámetros, se calculan las derivadas parciales del error respecto a cada uno de los parámetros obteniendo un sistema de 3 ecuaciones con 3 incógnitas.

$$\sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i + c)x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i^2$$
$$\sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i + c)x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i$$
$$\sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i + c) = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

Desarrollando el lado izquierdo de ambas ecuaciones:

$$
\begin{aligned}
(\sum_{i=1}^{n} x_i^4)a + (\sum_{i=1}^{n} x_i^3)b + (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)c &= \sum_{i=1}^{n} y_i x_i^2 \\
(\sum_{i=1}^{n} x_i^3)a + (\sum_{i=1}^{n} x_i^2)b + (\sum_{i=1}^{n} x_i)c &= \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \\
(\sum_{i=1}^{n} x_i^2)a + (\sum_{i=1}^{n} x_i)b + (\sum_{i=1}^{n} 1)c &= \sum_{i=1}^{n} y_i
\end{aligned}
$$

Reescribiendo el sistema en términos de matrices:

$$
\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^4 & \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^3 & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i x_i^2 \\ \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{pmatrix} \tag{2}
$$

2. Resultados ajuste mínimos cuadrados

2.1. Ajuste con linea recta

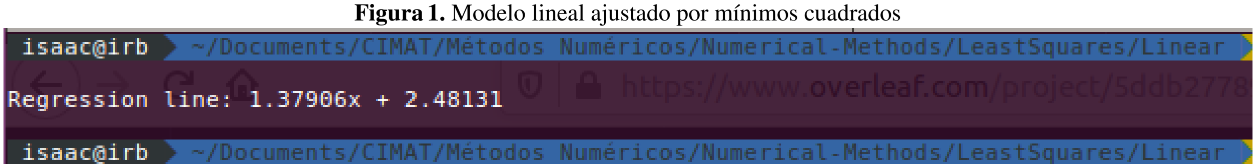
Para el caso de la linea recta $y = mx + b$, se usó el siguiente modelo:

$$
y = 1{,}37x + 2{,}43 \tag{3}
$$

Para introducir ruido, se usó una distribución Normal con media $\mu = y$ y varianza $\sigma = 1$. Se generó un conjunto de datos de 32 muestras en el rango $x \in [-5, 5]$.

Obteniendo como resultado, los siguientes coeficientes: $m = 1{,}37906$, $b = 2{,}48131$.

Figura 1. Modelo lineal ajustado por mínimos cuadrados



2.2. Ajuste con función cuadrática

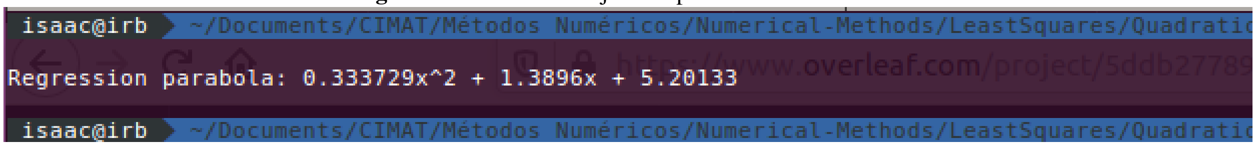
Para el caso de la linea recta $y = ax^2 + bx + c$, se usó el siguiente modelo:

$$
y = 0{,}3x^2 + 1{,}37x + 5{,}43; \tag{4}
$$

Para introducir ruido, se usó una distribución Normal con media $\mu = y$ y varianza $\sigma = 1$. Se generó un conjunto de datos de 32 muestras en el rango $x \in [-5, 5]$.

Obteniendo como resultado, los siguientes coeficientes: $a = 0{,}333729$, $b = 1{,}3896$, $c = 5{,}20133$.

Figura 2. Modelo lineal ajustado por mínimos cuadrados



3. Resultados método elemento finito

Para el caso de elemento finito, se usan los mismos modelos y mismos conjuntos de datos descritos en el apartado anterior.

En este caso, debido a que lo que se obtiene como resultado, son los coeficientes que le corresponden a cada nodo, se muestran las gráficas donde se compara el conjunto de puntos y los coeficientes encontrados por elemento finito, unidos por lineas rectas.

3.1. Ajuste modelo linea recta

Figura 3. Método elemento finito con 8 elementos y $\lambda = 0{,}01$

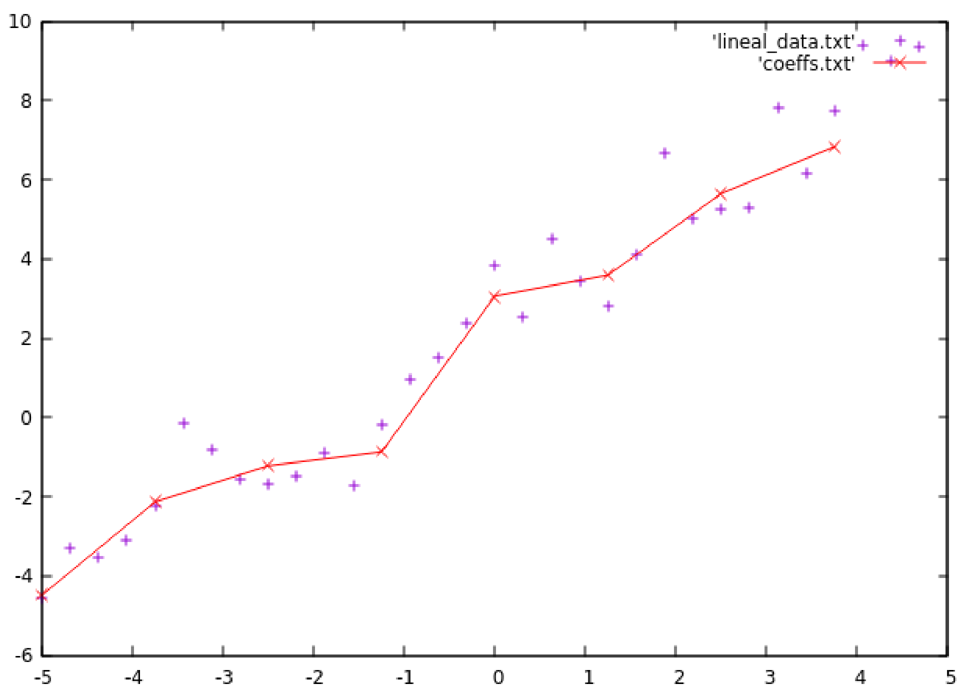
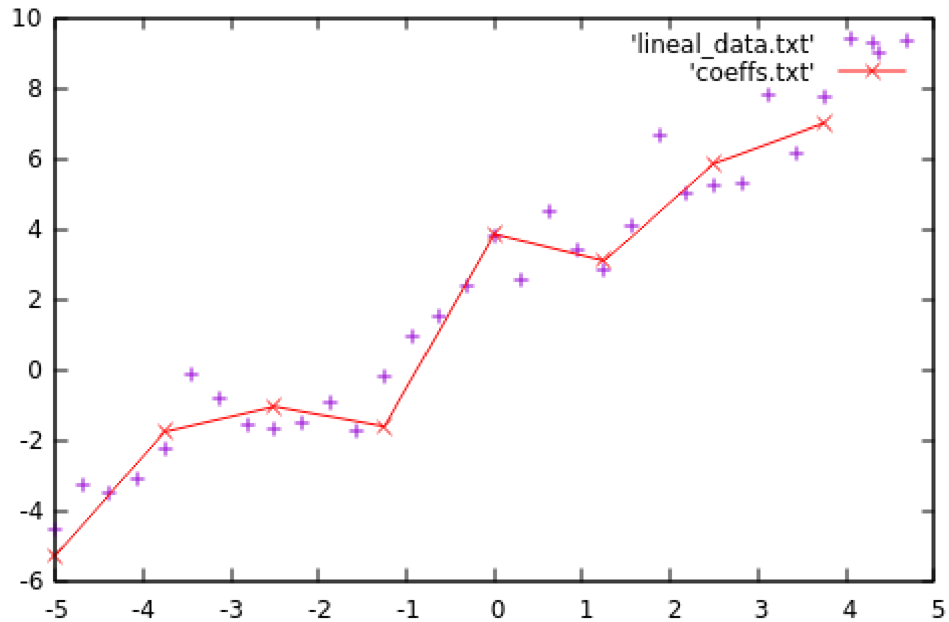


Figura 4. Método elemento finito con 8 elementos y $\lambda = 1{,}0$



3.2. Ajuste modelo cuadrático

Figura 5. Método elemento finito con 16 elementos y $\lambda = 0{,}01$

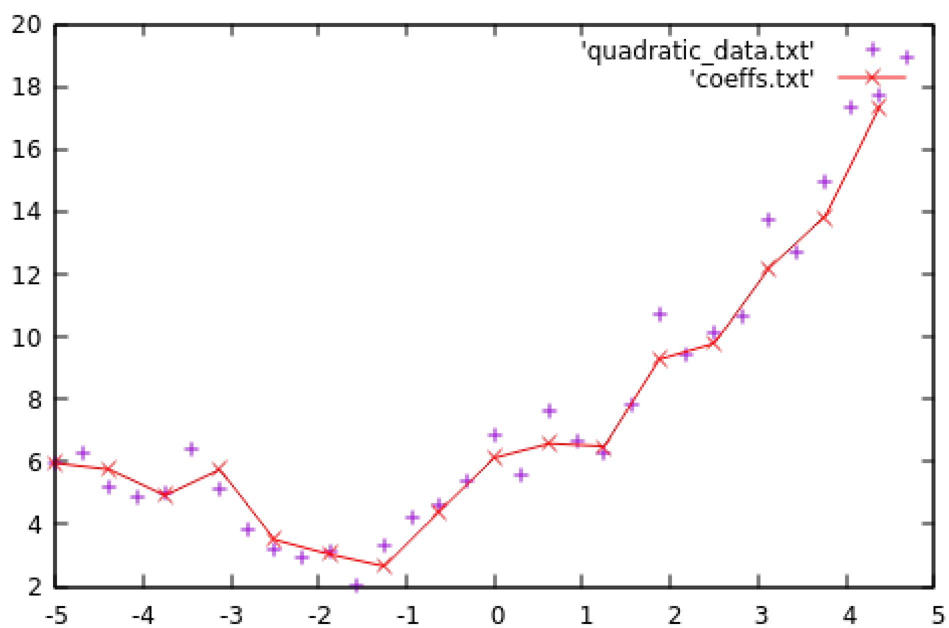
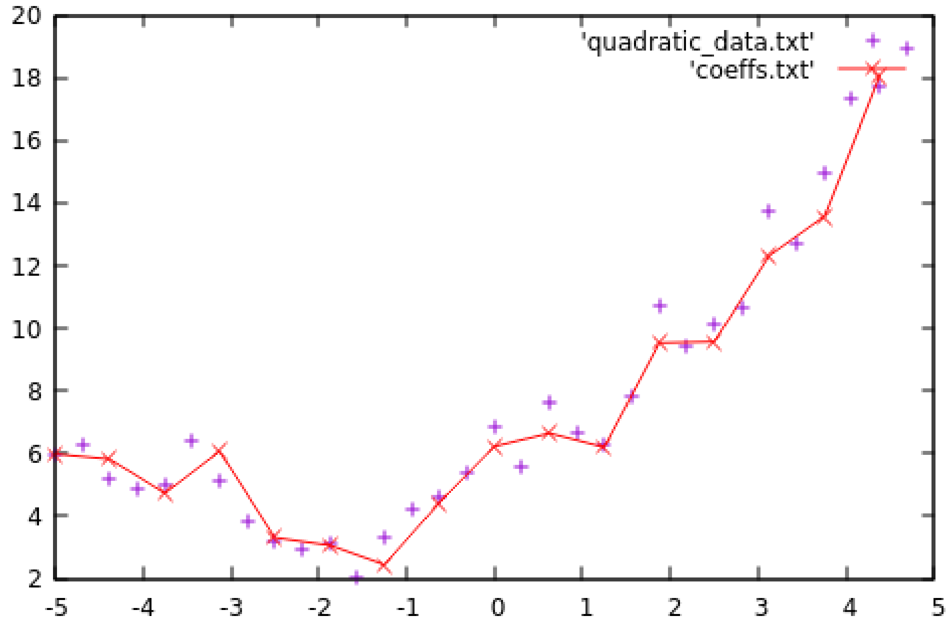


Figura 6. Método elemento finito con 16 elementos y $\lambda = 1{,}0$



4. Conclusiones

Pude observar que una de las ventajas de mínimos cuadrados es que es un método sencillo que no requiere mucho poder computacional ya que para el caso de un modelo lineal sólo se requiere invertir una matriz de 2×2 y en el caso de un modelo cuadrático invertir una matriz de 3×3, además de dar buenos resultados.

Una desventaja de mínimos cuadrados es que no siempre va a existir la inversa de la matriz, por ejemplo, cuando hay multicolinealidad en los datos.

En cuanto al método de elemento finito, observé que ofrece una mayor flexibilidad al poder reducir el problema de ajuste a cada uno de los elementos. Por lo que se pudo realizar un ajuste tanto con los datos del modelo lineal como los del modelo cuadrático sin tener que realizar ningún cambio en el método.

Finalmente, se pudo observar, como la variación del parámetro λ, que representa una penalización o término de regularización, afectó el ajuste resultante, ajustándose al ruido en mayor o menor medida dependiendo de su valor. Esto nos permite generar un ajuste más suave y que no recoja patrones que no son inherentes a los datos.