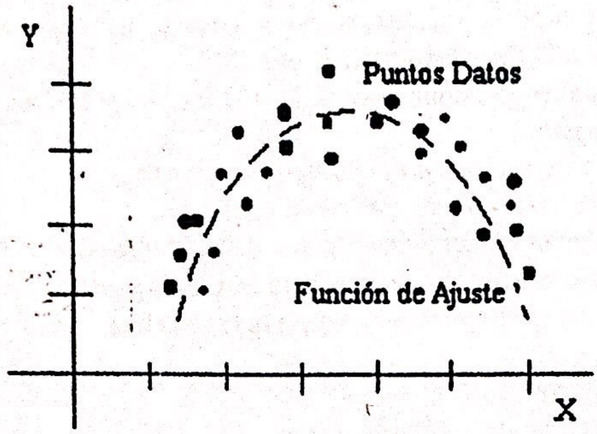
5.2. APROXIMACIÓN O AJUSTE A UNA CURVA POR EL MÉTODO DE MÍNIMOS CUADRADOS

Frecuentemente es necesario representar con una relación funcional cierto conjunto de datos en un sistema de ejes cartesianos X Y, como indica la figura ello ocurre cuando:



- Hay errores en las mediciones de valores experimentales y se busca semejar un alisado de las mediciones.
- Se desea conocer, a partir de valores discretos (x,y) obtenidos experimentalmente, el valor de ordenada correspondiente a un valor de abcisa cualquiera.
- Para extrapolar resultados cuando resulta antieconómico realizar ensayos para determinar rangos de x..

Todas las anteriores consideraciones se encaminan a encontrar una relación funcional, que podrá ser polinómica, trascendente, etc. según la naturaleza de los datos. El interrogante que se plantea en este punto es como medir el ajuste entre los datos y la relación funcional propuesta. Para ello se define el concepto de DESVIACION como la sumatoria de las diferencias entre los valores datos y los calculados con la curva de ajuste:

$$\sum_{k=1}^{n} (y_k - f(x_k))$$

Pero con esta expresión se cancelan los errores positivos con los negativos. Por ello se introduce el concepto de valor absoluto:

$$\sum_{k=1}^{n} | y_k - f(x_k) |$$

Como utilizaremos el cálculo diferencial y la función valor absoluto no tiene definida su derivada en el mínimo, se define el criterio de mínimos cuadrados de la siguiente manera:

$$S = \sum_{k=1}^{n} (\, y_k - f(x_k)\,)^2$$

Para determinar la función f(x) que mejor aproxima al conjunto de datos, se definirá, en forma genérica y según la naturaleza de los mismos, una función que contenga en su expresión uno o más coeficientes, por ahora desconocidos, cuyos valores se calcularán de manera que el valor que tome **S** sea el mínimo posible. Esto se logra igualando las derivadas parciales de **S** con respecto de cada coeficiente a cero. Si la función f(x) propuesta es una combinación lineal de funciones, la solución del problema nos conducirá a un sistema de ecuaciones lineales de lo contrario a un sistema de ecuaciones no lineales.

Si expresamos la función de aproximación como una combinación lineal de m funciones $\phi(x)$ tal que:

$$F(x) = \sum_{j=1}^{m} c_j\ \phi_j(x) = c_1\ \phi_1(x) + c_2\ \phi_2(x) + \ \ldots\ + c_m\ \phi_m(x)$$

Donde las funciones $\phi_j(x)$ serán convenientemente elegidas según la naturaleza del caso pudiendo tomar por ejemplo:

$\phi_j(x) = x^{(j-1)}$ (polinomio de grado n – 1)

$\phi_j(x) = \text{sen}(jx)$, etc.

Reemplazando f(x) en S:

$$S = \sum_{k=1}^{n} (\, y_k - f(x_k)\,)^2 = \sum_{k=1}^{n} \left(\, y_k - \sum_{j=1}^{m} c_j\ \phi j(x_k)\,\right)^2$$

Para obtener los coeficientes " c " que minimicen el valor de la función S, se debe igualar las derivadas parciales de S respecto de cada una de las variables " c " a 0. Desarrollando en forma genérica para el coeficiente **ci** se obtiene:

$$S = \sum_{k=1}^{n} \left(\, y_k^{\,2} - 2\, y_k \sum_{j=1}^{m} c_j\ \phi j(x_k) + \left(\sum_{j=1}^{m} c_j\ \phi j(x_k)\right)^2 \right)$$

$$\frac{\delta S}{\delta c_i} = (-2) \sum_{k=1}^{n} \left\{\ y_k\, \phi_i(x_k) - \left[\sum_{j=1}^{m} c_j\ \phi_j(x_k)\right] \phi_i(x_k)\ \right\} = 0$$

Reacomodando términos nos queda:

$$\sum_{j=1}^{m} c_j \sum_{k=1}^{n} \phi_i(x_k)\ \phi_j(x_k) = \sum_{k=1}^{n} y_k\ \phi_i(x_k)$$

Si se opera de manera similar para todos los coeficientes **cj**, se define un sistema de **m** ecuaciones lineales con **m** incógnitas, el cual puede expresarse matricialmente como:

$$\Phi \; C = b$$

donde: $$\phi_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \phi_i(x_k) \; \phi_j(x_k)$$

$$b_i = \sum_{k=1}^{n} y_k \; \phi_i(x_k)$$

Apreciar que la matriz Φ es simétrica.

Para el caso particular de un polinomio de grado m el sistema toma la forma:

$$\begin{array}{lllll}
c_1 \, n & + \; c_2 \sum x_k & + \ldots + \; c_{m+1} \sum x_k^{\,m} & = & \sum y_k \\
c_1 \sum x_k & + \; c_2 \sum x_k^2 & + \ldots + \; c_{m+1} \sum x_k^{\,m+1} & = & \sum (x_k \; y_k) \\
\ldots & & & & \\
c_1 \sum x_k^m & + \; c_2 \sum x_k^{m+1} & + \ldots + \; c_{m+1} \sum x_k^{\,2m} & = & \sum (x_k^{\,m} \; y_k)
\end{array}$$

(Observar que se ha simplificado la variación de "**k**" en la sumatoria **k=1 hasta n**)

Si la función de aproximación propuesta no puede expresarse como una combinación lineal de funciones, como por ejemplo los casos,

$f(x) = c_1 \; e^{c2x}$

$f(x) = c_1 \operatorname{sen}(c_2 \, x)$

etc.

la determinación de los coeficientes, igualando a cero las derivadas parciales de **S** respecto de cada una de las incógnitas, nos conducirá a la resolución de un ***sistema de ecuaciones no lineales***.

EJEMPLO:

Un determinado equipo automovilista esta calibrando las gomas de su representante en formula 1 de tal forma que en el gran precio de Argentina, en Buenos Aires, los autos desarrollen una velocidad óptima.

Se han realizado varias pruebas, dando como resultado para diferentes libras de presión, diferentes velocidades.

Se ha comprobado que para iguales libras, nunca se dan los mismos resultados de velocidad, pero si se puede estimar el promedio.

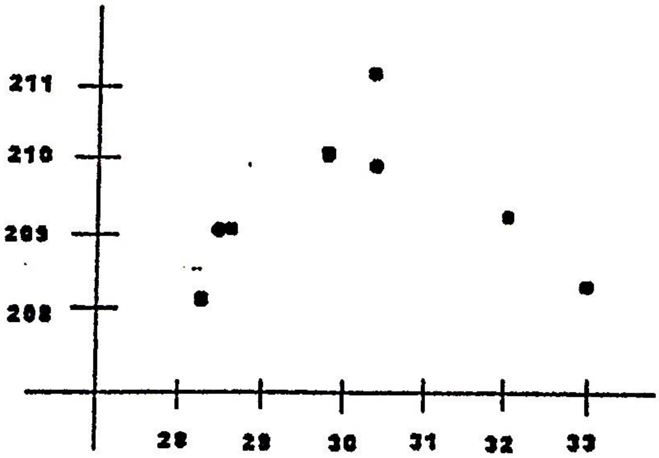
La siguiente tabla muestra los resultados de las pruebas :

Libras	Km. / h
28,2	208
28,5	209
28,6	209
30	210
30,5	209,9
30,5	211
32,1	209
33	208

Desarrollo :

Para resolver este problema, debemos aproximar los puntos con una determinada función, ya que los datos con que nos manejamos no son exactos, es decir, son aproximados.

Ahora bien, para saber que modelo matemático utilizar, confeccionamos el diagrama de dispersión :



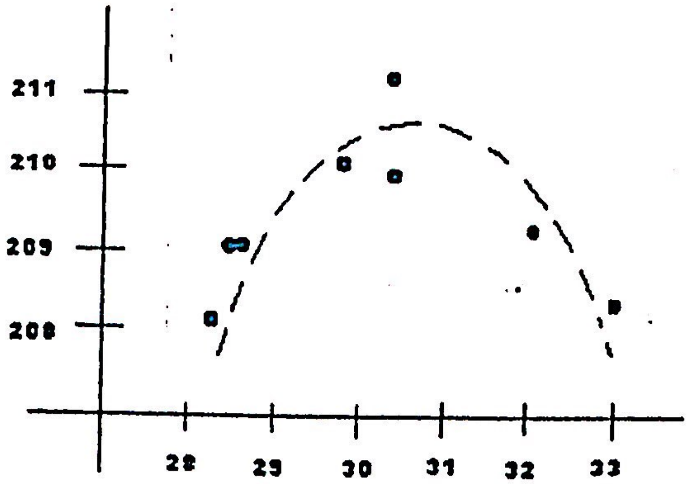
Como se puede ver, la función de aproximación que mejor aproxima el modelo, es la función cuadrática, la cual tiene la siguiente forma :

$$Y = C_1X^2 + C_2 X + C_3$$

siendo

$\Phi_1 = X^2$ $\Phi_2 = X$ $\Phi_3 = 1$

Gráficamente :



Calculando para encontrar los coeficientes de la mejor parábola de todas las posibles para representar los datos, obtenemos la tabla de resultados y la respectiva matriz Φ :

X	Y	Φ_1	Φ_2	Φ_3	$(\Phi_1)^2$	$\Phi_1 * \Phi_2$	$\Phi_1 * \Phi_3$	$(\Phi_2)^2$	$\Phi_2 * \Phi_3$	$(\Phi_3)^2$	$Y * \Phi_1$	$Y * \Phi_2$	$Y * \Phi_3$
28,2	208	795,24	28,2	1	632406,658	22425,768	795,24	795,24	28,2	1	165409,92	5865,6	208
28,5	209	812,25	28,5	1	659750,063	23149,125	812,25	812,25	28,5	1	169760,25	5956,5	209
28,6	209	817,96	28,6	1	669058,562	23393,656	817,96	817,96	28,6	1	170953,64	5977,4	209
30	210	900	30	1	810000	27000	900	900	30	1	189000	6300	210
30,5	209,9	930,25	30,5	1	865365,063	28372,625	930,25	930,25	30,5	1	195259,475	6401,95	209,9
30,5	211	930,25	30,5	1	865365,063	28372,625	930,25	930,25	30,5	1	196282,75	6435,5	211
32,1	209	1030,41	32,1	1	1061744,77	33076,161	1030,41	1030,41	32,1	1	215355,69	6708,9	209
33	208	1089	33	1	1185921	35937	1089	1089	33	1	22651[illegible]	6864	208
		7305,36	241,4	8	6749611,17	221726,96	7305,36	7305,36	241,4	8	1528533,73	50509,85	1673,9

quedándonos

$$\left|\begin{array}{rrr|r} 6749611,17 & 221726,96 & 7305,36 & 1528533,725 \\ 221726,96 & 7305,36 & 241,4 & 50509,85 \\ 7305,36 & 241,4 & 8 & 1673,9 \end{array}\right|$$

y resolviendo por alguno de los métodos de matrices simétricas nos queda

C_1	C_2	C_3
-0,38921096	23,73256064	-151,476743

Ahora que tenemos la función de aproximación $Y = -0,38921096\ X^2 + 23,73256064\ X - 151,476743$, debemos encontrar la calibración que haga óptima la velocidad del automóvil, es decir, debemos encontrar el máximo de la función ; para ello derivamos Y e igualamos su primera derivada a cero :

$$Y' = 2 * (-0,38921096) * X + 23,73256064 = 0$$

Luego de los procesos de calculo correspondientes, concluimos que en Buenos Aires, para que el equipo logre toda la potencia de su automóvil, debe calibrar las gomas a **30,4880426** libras para obtener una velocidad promedio de **210,302915** Km. / h.

Observe que hablamos de promedio dado que las ordenadas son estimaciones puntuales de la media poblacional todos los valores de Y condicionados al X.