



Ajuste de Curvas

PhD. Alejandro Paredes

Motivación:

Se desea interpolar o extrapolar información a partir de datos experimentales

Se tienen dos opciones:

- Buscar una función (compleja) que pase por todos los puntos.
- Buscar una función simple que pase solo por algunos .

Los datos contienen mucha incertidumbre:

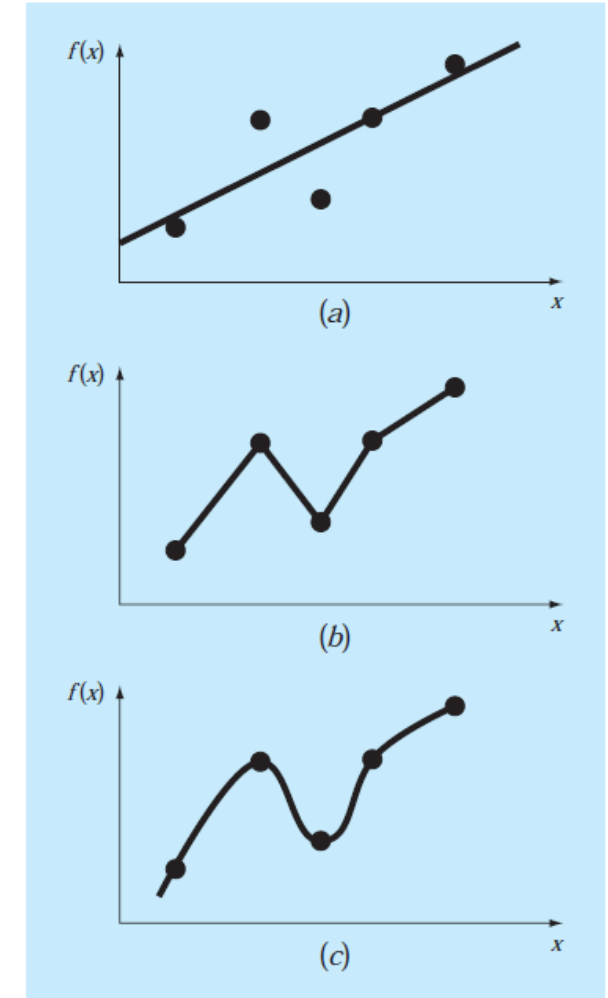
Curva pasa solo por algunos puntos y que expresa la tendencia.

Regression por minimos cuadrados.

Si los datos contienen poca incertidumbre:

Curva que pase exactamente por los puntos.

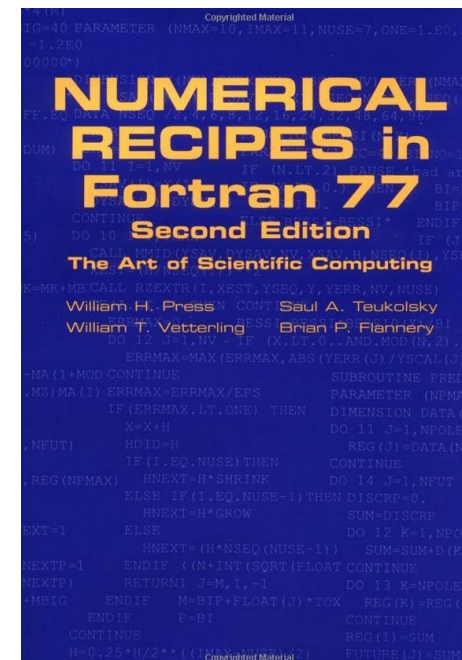
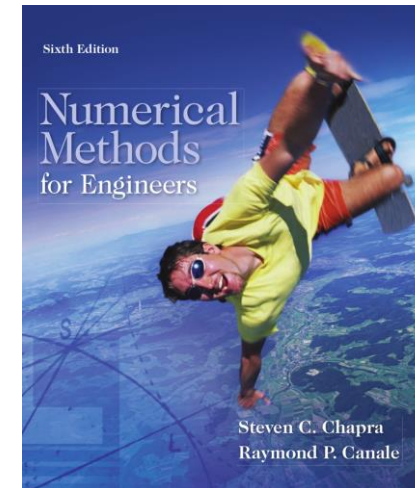
Interpolación polinomial.



Motivación:

Aplicaciones del ajuste de curvas

- Test de hypothesis : Se desea es comparar un modelo matemático con los datos experimentales . Se propone un modelo y se buscan los parámetros del modelo.
- Adicionalmente el ajuste de curvas es importante para la integración numérica, solución aproximada de ecuaciones diferenciales . También se puede utilizar para aproximar funciones complejas a funciones simples.





Estadística inferencial

Mediciones del coeficiente de expansión térmica del acero (10^{-6} F^{-1})

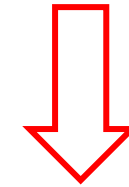
6.495	6.595	6.615	6.635	6.485	6.555
6.665	6.505	6.435	6.625	6.715	6.655
6.755	6.625	6.715	6.575	6.655	6.605
6.565	6.515	6.555	6.395	6.775	6.685

Media= 6.6

$S_y = 0.0971$

c.v.=1.47%

Información adicional se tiene con la media aritmética del conjunto, el grado de esparcimiento del conjunto llamado desviación estándar S_y (variancia) y el coeficiente de varaiación CV (error porcentual relativo)



$$\bar{y} = \frac{\sum y_i}{n}$$

$$S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$$

$$s_y = \sqrt{\frac{S_t}{n-1}}$$

$$s_y^2 = \frac{\sum y_i^2 - (\sum y_i)^2 / n}{n-1}$$

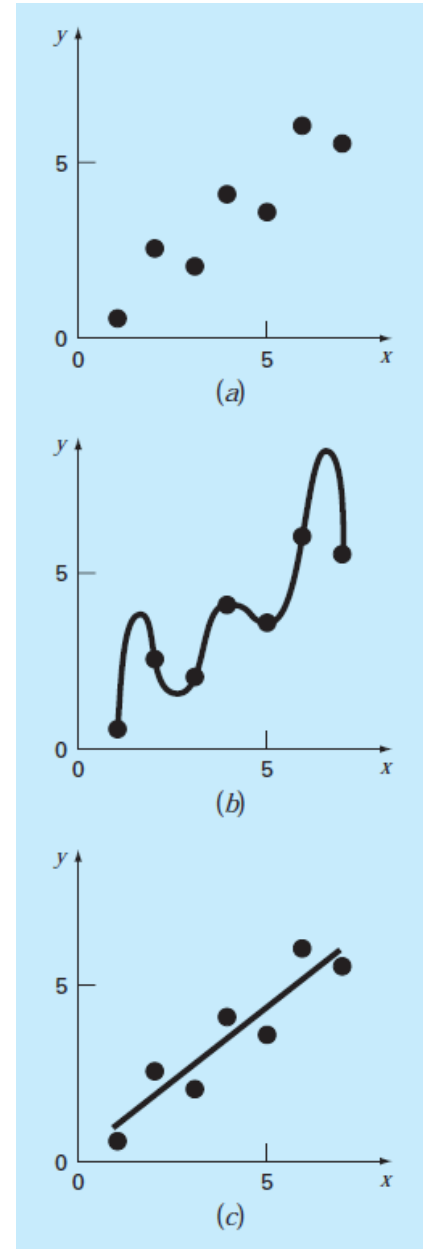
$$\text{c.v.} = \frac{s_y}{\bar{y}} 100\%$$

Regresión lineal

Considere que se tiene un conjunto de puntos con alta incertidumbre .

El caso mas simple es ajustar los datos $(x_1, y_1)(x_2, y_2) \dots (x_n, y_n)$ a una línea recta de la forma

$$y(x) = a_0 + a_1x + e; \quad e = \text{error o residuo}$$



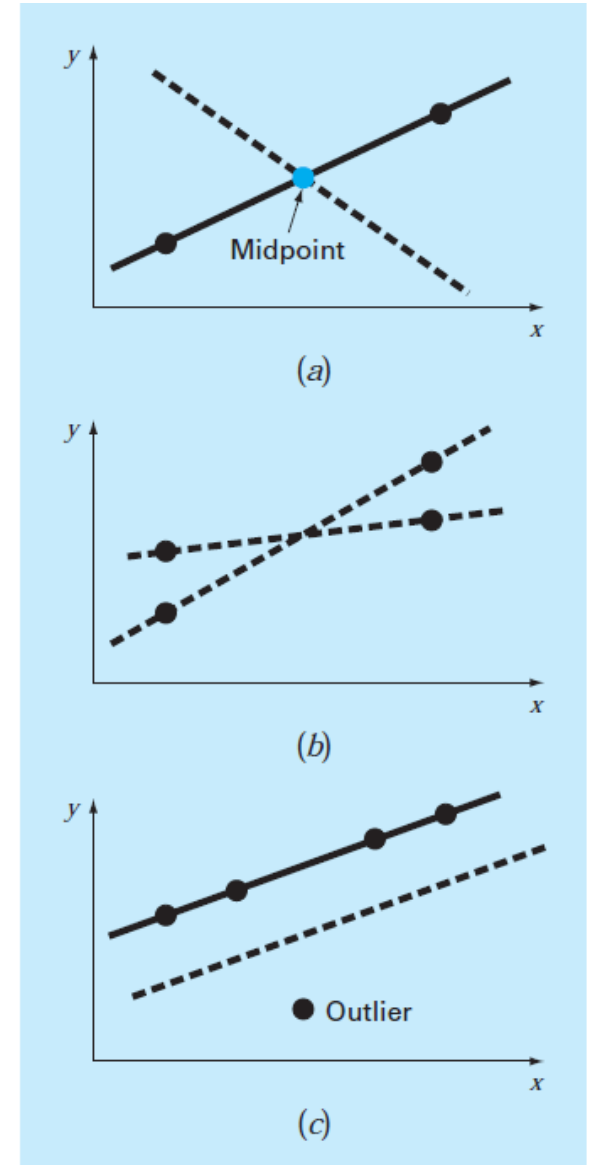
Regresión lineal

Opciones para encontrar los coeficientes:

$$\sum_{i=1}^n e_i = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i) \quad \bullet \quad \text{Cualquier línea que pase por el punto central verifica la condición. Menos la vertical.}$$

$$\sum_{i=1}^n |e_i| = \sum_{i=1}^n |y_i - a_0 - a_1 x_i| \quad \bullet \quad \text{Cualquier línea entre las líneas punteadas verifica la condición.}$$

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,\text{measured}} - y_{i,\text{model}})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$





Regresion lineal por mínimos cuadrados

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,\text{measured}} - y_{i,\text{model}})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum [(y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i]$$

$$0 = \sum y_i - \sum a_0 - \sum a_1 x_i$$

$$0 = \sum y_i x_i - \sum a_0 x_i - \sum a_1 x_i^2$$

$$n a_0 + \left(\sum x_i \right) a_1 = \sum y_i$$

$$\left(\sum x_i \right) a_0 + \left(\sum x_i^2 \right) a_1 = \sum x_i y_i$$

$$a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x}$$

Regresion lineal por mínimos cuadrados



Ejemplo

x_i	y_i	$(y_i - \bar{y})^2$	$(y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$
1	0.5	8.5765	0.1687
2	2.5	0.8622	0.5625
3	2.0	2.0408	0.3473
4	4.0	0.3265	0.3265
5	3.5	0.0051	0.5896
6	6.0	6.6122	0.7972
7	5.5	4.2908	0.1993
Σ	24.0	22.7143	2.9911

$$y = 0.07142857 + 0.8392857x$$

$$n = 7 \quad \sum x_i y_i = 119.5 \quad \sum x_i^2 = 140$$

$$\sum x_i = 28 \quad \bar{x} = \frac{28}{7} = 4$$

$$\sum y_i = 24 \quad \bar{y} = \frac{24}{7} = 3.428571$$

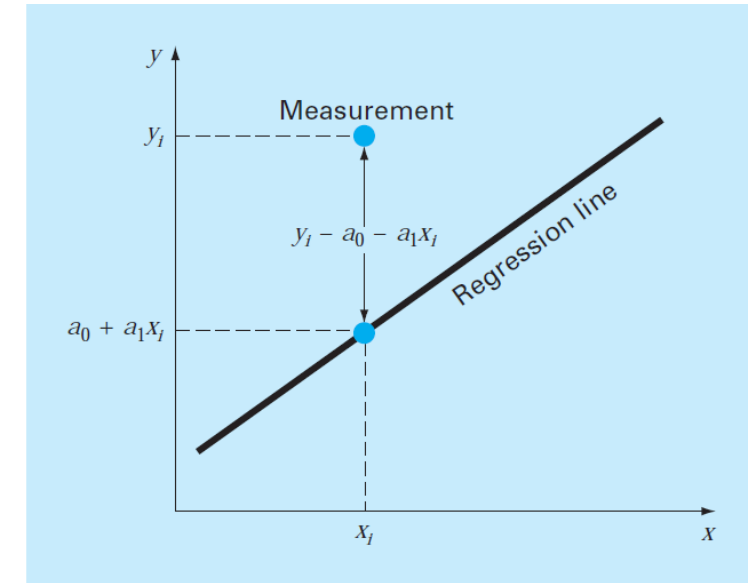
$$a_1 = \frac{7(119.5) - 28(24)}{7(140) - (28)^2} = 0.8392857$$

$$a_0 = 3.428571 - 0.8392857(4) = 0.07142857$$

Cuantificación del error

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,\text{measured}} - y_{i,\text{model}})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

Se puede calcular



Desviación estándar de estimación del error debido al ajuste

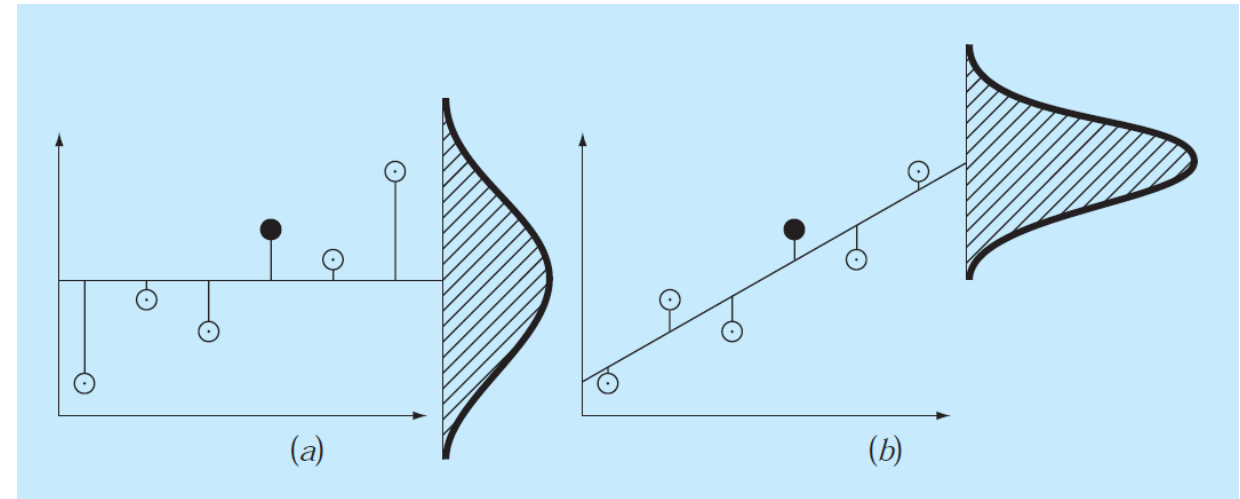
$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}}$$

Error standard de la estimación

Desviación estándar estadística

$$s_y = \sqrt{\frac{S_t}{n-1}}$$

$$S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$$



Cuantificación del error

Coeficiente de determinación

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

- $r=1$ implica $S_r=0$ y el ajuste pasa por todos los puntos
- $r=0$ implica $S_t=S_r$ el error del ajuste es igual al error estadístico y no se ha ganado nada.

Coeficiente de correlación

$$r = \frac{n \sum x_i y_i - (\sum x_i)(\sum y_i)}{\sqrt{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \sqrt{n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2}}$$

$$s_t = \sqrt{\frac{22.7143}{7-1}} = 1.9457 \quad s_{y/x} = \sqrt{\frac{2.9911}{7-2}} = 0.7735$$

$$r^2 = \frac{22.7143 - 2.9911}{22.7143} = 0.868 \quad r = \sqrt{0.868} = 0.932$$

Algoritmo

SUB Regress(x, y, n, a1, a0, syx, r2)

sumx = 0: sumxy = 0: st = 0

sumy = 0: sumx2 = 0: sr = 0

DOFOR i = 1, n

sumx = sumx + x_i

sumy = sumy + y_i

*sumxy = sumxy + x_i*y_i*

*sumx2 = sumx2 + x_i*x_i*

END DO

xm = sumx/n

ym = sumy/n

*a1 = (n*sumxy - sumx*sumy)/(n*sumx2 - sumx*sumx)*

*a0 = ym - a1*xm*

DOFOR i = 1, n

st = st + (y_i - ym)²

*sr = sr + (y_i - a1*x_i - a0)²*

END DO

syx = (sr/(n - 2))^{0.5}

r2 = (st - sr)/st

END Regress

Ejemplo: Caída de un paracaidista

$$v(t) = \frac{gm}{c} (1 - e^{(-c/m)t})$$

$$v(t) = \frac{gm}{c} \left(\frac{t}{3.75 + t} \right)$$

$$v_{\text{model}} = -0.859 + 1.032 v_{\text{measure}}$$

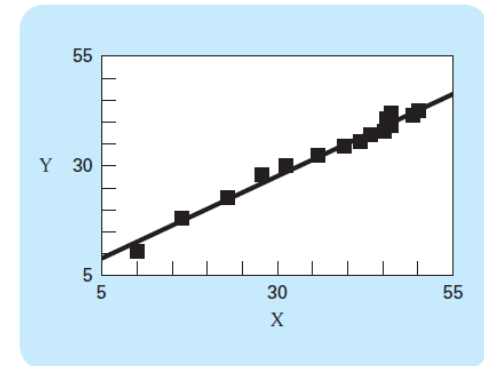
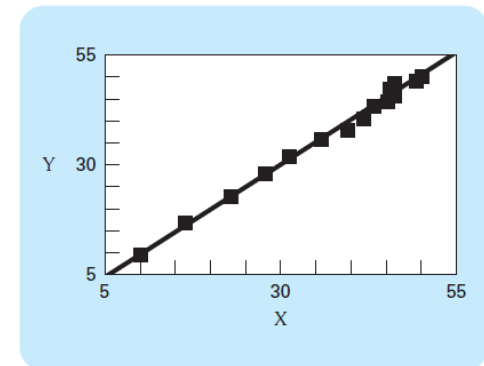
Time, s	Measured v , m/s (a)	Model-calculated v , m/s (b)	Model-calculated v , m/s (c)
1	10.00	8.953	11.240
2	16.30	16.405	18.570
3	23.00	22.607	23.729
4	27.50	27.769	27.556
5	31.00	32.065	30.509
6	35.60	35.641	32.855
7	39.00	38.617	34.766
8	41.50	41.095	36.351
9	42.90	43.156	37.687
10	45.00	44.872	38.829
11	46.00	46.301	39.816
12	45.50	47.490	40.678
13	46.00	48.479	41.437
14	49.00	49.303	42.110
15	50.00	49.988	42.712

$$c = 12.5 \text{ kg/s}$$

$$r > 0.99$$

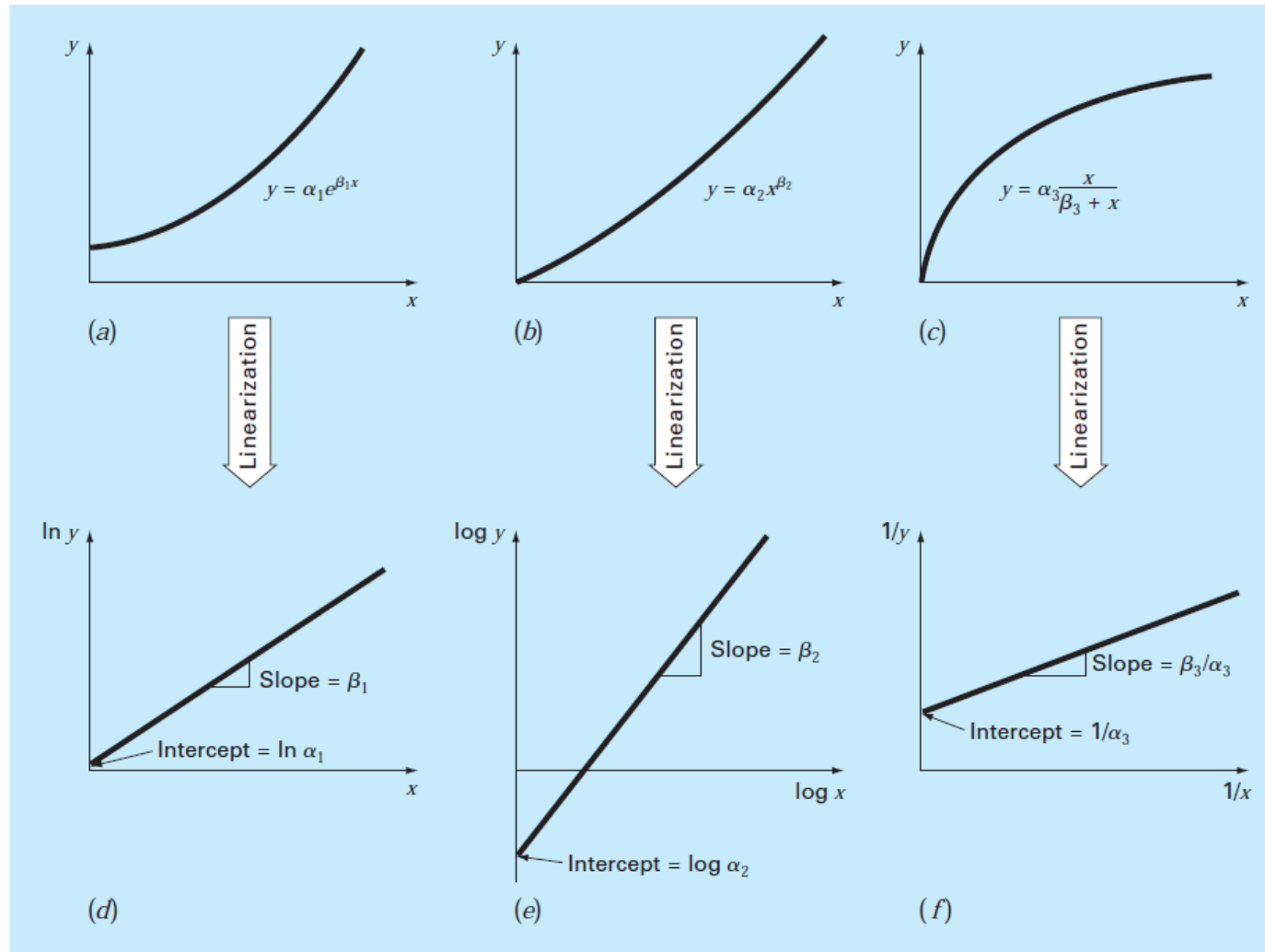
$$r > 0.99$$

Intervalos de confianza de los parámetros encontrados !!!



$$v_{\text{model}} = 5.776 + 0.752 v_{\text{measure}}$$

Linearización de dependencias no lineales



- Solo algunas relaciones se pueden linealizar.
- Una vez que se han linealizado, se puede utilizar la regresión lineal por mínimos cuadrados.

$$y = \alpha_1 e^{\beta_1 x} \quad \ln(y) = \ln(\alpha_1) + \beta_1 x$$

$$y = \alpha_2 x^{\beta_1} \quad \ln(y) = \ln(\alpha_2) + \beta_2 \ln(x)$$

$$y = \alpha_3 \frac{x}{\beta_3 + x} \quad \frac{1}{y} = \frac{\beta_3}{\alpha_3} \frac{1}{x} + \frac{1}{\alpha_3}$$



Regresión polinomial

Deseamos ajustar un conjunto de datos a un polinomio de orden 2

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m + e$$

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$$

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2$$

$$(n) a_0 + \left(\sum x_i \right) a_1 + \left(\sum x_i^2 \right) a_2 = \sum y_i$$

$$\left(\sum x_i \right) a_0 + \left(\sum x_i^2 \right) a_1 + \left(\sum x_i^3 \right) a_2 = \sum x_i y_i$$

$$\left(\sum x_i^2 \right) a_0 + \left(\sum x_i^3 \right) a_1 + \left(\sum x_i^4 \right) a_2 = \sum x_i^2 y_i$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum x_i (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2 \sum x_i^2 (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

Error standard de la estimación:

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}} \quad m = 2$$



Algoritmo para regresión polinomial

La matriz simétrica a_{ij} es la matriz aumentada
Correspondiente al sistema lineal

$$\begin{aligned}(n)a_0 + \left(\sum x_i\right) a_1 + \left(\sum x_i^2\right) a_2 &= \sum y_i \\ \left(\sum x_i\right) a_0 + \left(\sum x_i^2\right) a_1 + \left(\sum x_i^3\right) a_2 &= \sum x_i y_i \\ \left(\sum x_i^2\right) a_0 + \left(\sum x_i^3\right) a_1 + \left(\sum x_i^4\right) a_2 &= \sum x_i^2 y_i\end{aligned}$$

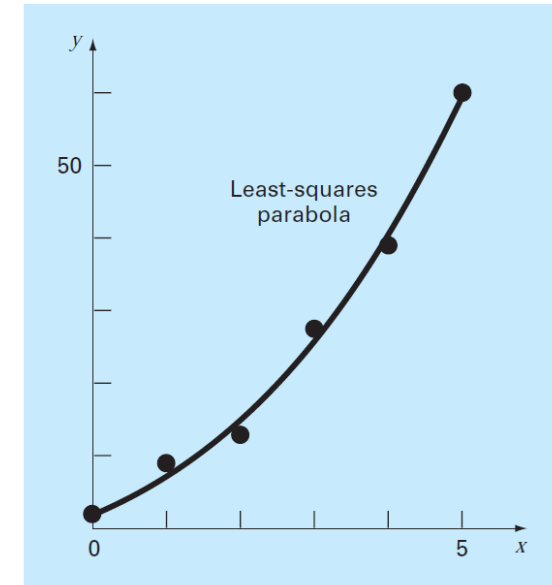
```
DOFOR i = 1, order + 1
  DOFOR j = 1, i
    k = i + j - 2
    sum = 0
    DOFOR l = 1, n
      sum = sum + x_l^k
    END DO
    a_i,j = sum
    a_j,i = sum
  END DO
  sum = 0
  DOFOR l = 1, n
    sum = sum + y_l * x_l^{i-1}
  END DO
  a_i,order+2 = sum
END DO
```

Regresión polinomial



Ejemplo

x_i	y_i	$(y_i - \bar{y})^2$	$(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)^2$
0	2.1	544.44	0.14332
1	7.7	314.47	1.00286
2	13.6	140.03	1.08158
3	27.2	3.12	0.80491
4	40.9	239.22	0.61951
5	61.1	1272.11	0.09439
Σ	152.6	2513.39	3.74657



$$\begin{array}{lll}
 m = 2 & \sum x_i = 15 & \sum x_i^4 = 979 \\
 n = 6 & \sum y_i = 152.6 & \sum x_i y_i = 585.6 \\
 \bar{x} = 2.5 & \sum x_i^2 = 55 & \sum x_i^2 y_i = 2488.8 \\
 \bar{y} = 25.433 & \sum x_i^3 = 225 &
 \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 152.6 \\ 585.6 \\ 2488.8 \end{Bmatrix} \quad \begin{array}{ll} a_0 = 2.47857 & a_1 = 2.35929 \\ a_2 = 1.86071 & \end{array}$$

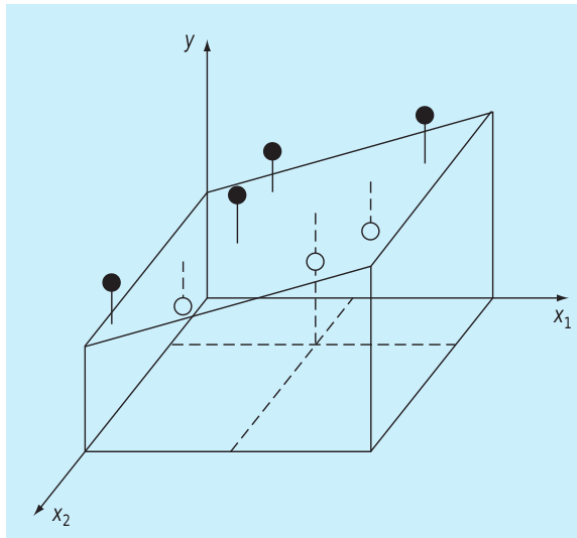
$$y = 2.47857 + 2.35929x + 1.86071x^2 \quad s_{y/x} = \sqrt{\frac{3.74657}{6-3}} = 1.12 \quad r^2 = 0.99851$$

Regresión lineal múltiple



Extender la regresión lineal para el caso de una función de varias variables.

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + e$$



La cantidad a minimizar será:

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_{1i} - a_2x_{2i})^2$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum (y_i - a_0 - a_1x_{1i} - a_2x_{2i})$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum x_{1i} (y_i - a_0 - a_1x_{1i} - a_2x_{2i})$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2 \sum x_{2i} (y_i - a_0 - a_1x_{1i} - a_2x_{2i})$$

Regresión lineal múltiple



Obteniendo el correspondiente sistema lineal

$$\begin{bmatrix} n & \sum X_{1i} & \sum X_{2i} \\ \sum X_{1i} & \sum X_{1i}^2 & \sum X_{1i} X_{2i} \\ \sum X_{2i} & \sum X_{1i} X_{2i} & \sum X_{2i}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum y_i \\ \sum X_{1i} y_i \\ \sum X_{2i} y_i \end{Bmatrix}$$

La regresión puede ser útil para ajustar relaciones del tipo

$$y = a_0 x_1^{a_1} x_2^{a_2} \cdots x_m^{a_m} \quad \Rightarrow \quad \log y = \log a_0 + a_1 \log x_1 + a_2 \log x_2 + \cdots + a_m \log x_m$$



Regresión no lineal

- Minimizar el cuadrado de los residuos
- La ecuación no lineal se lineariza con una expansión de Taylor.

$$y_i = f(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m) + e_i$$

Proceso iterativo para un caso con 2 parámetros:

$$f(x_i)_{j+1} = f(x_i)_j + \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_0} \Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_1} \Delta a_1$$

$$y_i - f(x_i)_j = \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_0} \Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_1} \Delta a_1 + e_i$$

$$\{D\} = [Z_j] \{\Delta A\} + \{E\}$$

- y_i : valor medido de la variable dependiente
- $f(x_i; a_0, \dots, a_n)$: ecuación que es función de la variable independiente x_i y función no-lineal de los parámetros a_1, a_2, \dots, a_n y e_i = error aleatorio
- $f(x_i)$: Aproximación de Taylor de la función no-lineal alrededor de los parámetros y truncada a la primera derivada.
- j = estimación inicial
- $j+1$ = predicción
- $\Delta a_0 = a_{0j+1} - a_{0j}$ y $\Delta a_1 = a_{1j+1} - a_{1j}$.



Regresión no-lineal

$$[Z_j] = \begin{bmatrix} \partial f_1 / \partial a_0 & \partial f_1 / \partial a_1 \\ \partial f_2 / \partial a_0 & \partial f_2 / \partial a_1 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \partial f_n / \partial a_0 & \partial f_n / \partial a_1 \end{bmatrix}$$

- $[Z_j]$: Matriz de derivadas parciales evaluadas en la j-esima estimación.
- n: numero de datos
- $\frac{\partial f_i}{\partial a_k}$ = derivada parcial de la función f con respecto al k-esimo parámetro evaluada en el i-esimo dato

$$\{D\} = \begin{Bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n - f(x_n) \end{Bmatrix}$$

$$\{\Delta A\} = \begin{Bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \Delta a_m \end{Bmatrix}$$



Regresión no-lineal

Deseamos minimizar el error

$$e_i = y_i - f(x_i; a_0, a_1, \dots, a_m)$$

Con respecto a los parámetros a_0, a_1, \dots, a_m

$$S = \sum_{i=0, n} e_i^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial S}{\partial a_l} = 0$$

$$\sum_{i=1, n} 2e_i \frac{\partial e_i}{\partial a_l} = 0$$

Del proceso recursivo tenemos

$$e_i = y(x_i) - f(x_i, a_1, \dots, a_m)$$

$$e_i = y(x_i) - f(x_i, a^j) - Z_{ik}^j \Delta A_k$$

$$e_i = D_i - Z_{ik}^j \Delta A_k$$

$$\frac{\partial e_i}{\partial a_l} = -Z_{il}^j$$

Condición de minimos cuadrados

$$\Rightarrow Z^{jT} Z^j \Delta A = Z^{jT} D$$

Sistema lineal para ΔA

$$a_{0,j+1} = a_{0,j} + \Delta a_0$$

$$a_{1,j+1} = a_{1,j} + \Delta a_1$$



Ejemplo: Ajustar el conjunto de puntos con la función $f(x; a_0, a_1)$ considerando la estimación inicial $a_0 = a_1 = 1$

x	0.25	0.75	1.25	1.75	2.25
y	0.28	0.57	0.68	0.74	0.79

$$f(x; a_0, a_1) = a_0(1 - e^{-a_1 x})$$

$$\{D\} = \begin{Bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \vdots \\ y_n - f(x_n) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.28 - 0.2212 \\ 0.57 - 0.5276 \\ 0.68 - 0.7135 \\ 0.74 - 0.8262 \\ 0.79 - 0.8946 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.0588 \\ 0.0424 \\ -0.0335 \\ -0.0862 \\ -0.1046 \end{Bmatrix} \quad [Z_j] = \begin{bmatrix} \partial f_1 / \partial a_0 & \partial f_1 / \partial a_1 \\ \partial f_2 / \partial a_0 & \partial f_2 / \partial a_1 \\ \vdots & \vdots \\ \partial f_n / \partial a_0 & \partial f_n / \partial a_1 \end{bmatrix} \quad [Z_0] = \begin{bmatrix} 0.2212 & 0.1947 \\ 0.5276 & 0.3543 \\ 0.7135 & 0.3581 \\ 0.8262 & 0.3041 \\ 0.8946 & 0.2371 \end{bmatrix}$$

Sistema lineal

$$a_{0,j+1} = a_{0,j} + \Delta a_0$$

$$a_{1,j+1} = a_{1,j} + \Delta a_1$$

$$[[Z_j]^T [Z_j]] \{\Delta A\} = \{[Z_j]^T \{D\}\} \quad \Delta A = \begin{Bmatrix} -0.2714 \\ 0.5019 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1.0 \\ 1.0 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} -0.2714 \\ 0.5019 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.7286 \\ 1.5019 \end{Bmatrix}$$



Ejercicio 1

A continuación se muestra un modelo para el conjunto de datos mostrado

$$y = \left(\frac{a + \sqrt{x}}{b\sqrt{x}} \right)^2$$

x	0.5	1	2	3	4
y	10.4	5.8	3.3	2.4	2

- Linearizar la ecuación del modelo.
- Utilizar una regresión lineal para determinar a y b

Ejercicio 2

A continuación se muestra un modelo para el conjunto de datos mostrado

$y = \alpha_4 x e^{\beta_4 x}$	x	0.1	0.2	0.4	0.6	0.9	1.3	1.5	1.7	1.8
	y	0.75	1.25	1.45	1.25	0.85	0.55	0.35	0.28	0.18

- Linearizar la ecuación del modelo y utilizar una regresión lineal para determinar α_4 y β_4 .
- Utilizar una regresión no lineal para determinar α_4 y β_4 .