# 1.3 Ajuste de curvas por mínimos cuadrados

#### Contents

- Introducción
- Otros modelos lineales
- Regresión por mínimos cuadrados generalizado
- Mínimos cuadrados en python
- Referencias

#### MEC301 - Metodos Numéricos

Profesor: Francisco Ramírez Cuevas

Fecha: 22 de Agosto 2022

#### Introducción

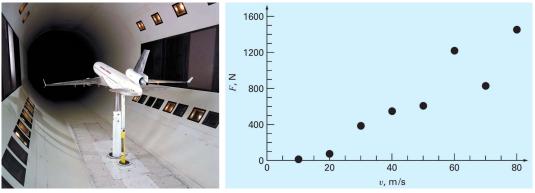
La gran mayoría de las fórmulas en la ciencia no pueden ser determinadas de forma teórica y debemos recurrir a relaciones empíricas en base a experimentos.

Por ejemplo, en mecánica de fluidos decimos que la fuerza de arrastre,  $F_D$  sobre un cuerpo es proporcional al cuadrado de la velocidad del flujo alrededor el cuerpo, V.

$$F_D = C_D V^2$$

Aunque esta relación es válida para cualquier cuerpo, el valor del coeficiente de arrastre  $C_D$ , cambia dependiendo del objeto.

En la gran mayoría de los casos, este valor no se puede determinar de forma analítica, y debemos recurrir a ensallos en un tunel de viento para determinar la relación entre estas dos variables.



El valor de  ${\cal C}_D$  estará dado por la curva que mejor se ajuste a estos valores experimentales.

#### Regresión lineal unidimensional

Consideremos el caso más simple donde buscamos la recta y=f(x) que mejor se ajuste a nuestros datos.

$$y = a_0 + a_1 x,$$

donde  $a_0$  y  $a_1$  son coeficientes representando el intercepto y la pendiente, respectivamente.

¿Cómo determinamos los coeficientes? Se puede demostrar que la mejor forma de determinar los coeficientes  $a_0$  y  $a_1$  es minimizando el error cuadrático:

$$S_r = \sum_{i=1}^m \left(y_i - a_0 - a_1 x_i
ight)^2.$$

donde  $i=1,\ldots,m$  son los datos de la muestra considerando un total de m datos.

Este criterio se denomina **ajuste por mínimos cuadrados**, y tiene un número de ventajas, como por ejemplo, entregar una solución única para un set de datos.

#### Ajuste por mínimos cuadrados paso a paso

Primero, para buscar el mínimo de  $S_r$  aplicamos la derivada respecto a sus variables, es decir,  $a_0$  y  $a_1$ 

$$egin{aligned} rac{\partial S_r}{\partial a_0} &= -2 \sum \left(y_i - a_0 - a_1 x_i
ight) \ rac{\partial S_r}{\partial a_1} &= -2 \sum \left[(y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i
ight] \end{aligned}$$

El mínimo está dado cuando ambas derivadas son 0.

$$0 = \sum y_i - a_0 \sum 1 - a_1 \sum x_i \ 0 = \sum y_i x_i - a_0 \sum x_i - a_1 \sum x_i^2$$

El resultado podemos expresarlo como un sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \end{bmatrix}$$

La solución de este sistema nos entregará los valores de  $a_0$  y  $a_1$ 

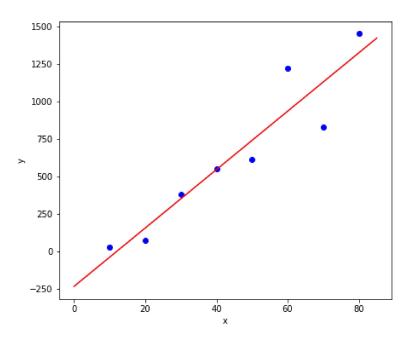
Consideremos los datos del problema del tunel de viento

```
Modelo lineal:
y = -234.286 + 19.470*x
```

```
# ploteamos nuestro resultado
import matplotlib.pyplot as plt
plt.rcParams.update({'font.size': 18})

# contruimos el modelo
y = lambda x: a[0] + a[1]*x
x = np.linspace(0,85,100) # creamos un arreglo para ploteo

plt.figure(figsize = (7,6))
plt.plot(xi, yi, 'bo')
plt.plot(x, y(x), '-r')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```



#### Cuantificación del error

Para cuantificar la calidad de nuestro modelo utilizamos el **coeficiente de determinación**,  $r^2$ :

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \tag{1}$$

donde  $S_r$  es el error del modelo lineal, y  $S_t=\sum (y_i-\bar{y})^2$  es la desviación de los datos respecto a la media  $\bar{y}$ .

El coeficiente de determinación nos permite cuantificar la calidad de nuestro modelo para representar una muestra, en comparación con la media  $\bar{y}$ .

En python este valor está dado por la función r2\_score de la librería scikit-learn

```
from sklearn.metrics import r2_score
print('coef. de determinación')
print('r2 = %.4f' % r2_score(yi,y(xi)))
```

```
coef. de determinación
r2 = 0.8805
```

El resultado indica que el modelo lineal explica un 88.05% de los datos

Notar que r2\_score(yi,y(xi))) requiere dos arreglos de iguales dimensiones.

#### Linealización de funciones no lineales

Existen algúnos modelos no lineales comúnes en ingeniería que pueden ser linealizados para luego realizar ajuste por mínimos cuadrados.

Algúnos ejemplos son:

modelo exponencial

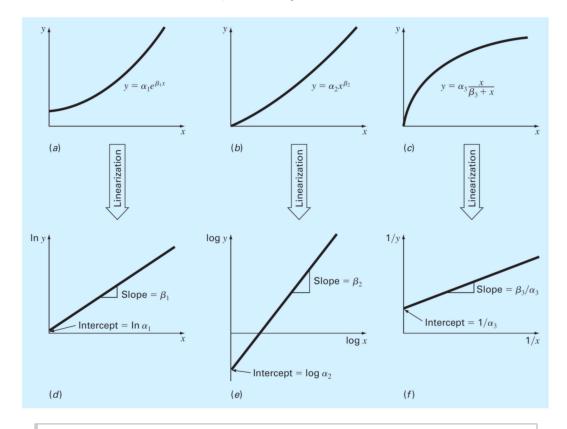
$$y = \alpha e^{\beta x} \Rightarrow \ln(y) = \ln(\alpha) + \beta x$$

modelo de potencia

$$y = \alpha x^{\beta} \Rightarrow \log(y) = \log(\alpha) + \beta \log(x)$$

• modelo de tasa de crecimiento de saturación

$$y = \alpha \frac{x}{\beta + x} \Rightarrow \frac{1}{y} = \frac{1}{\alpha} + \frac{\beta}{\alpha} \frac{1}{x}$$



Para el modelo de potencia, podemos usar " $\log$ " o " $\ln$ " para linealizar, tomando la precausión de usar la función inversa correcta para recuperar el modelo original, es decir:

$$y=10^{\log lpha+eta \log x}$$
 o $y=e^{\ln lpha+eta \ln x}$ 

Los coeficientes del modelo linealizado serán diferentes dependiendo de si se usa " $\log$ " o " $\ln$ ". Sin embargo, el modelo original debe ser el mismo, independientemente de la función utilizada para la linealización.

Analicemos el ejemplo anterior, ahora ajustando los datos al modelo de potencia  $y=\alpha x^{\beta}$ 

```
import numpy as np
from numpy import \log \# en \ python \ log(x) = ln(x)
xi = np.array([10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80])
yi = np.array([25, 70, 380, 550, 610, 1220, 830, 1450])
# linealizamos las variables
log xi = log(xi)
log_yi = log(yi)
\# construimos un sistema Ax = b
m = len(xi) # numero de datos
A = np.array([[ m , np.sum(log_xi) ],
             [np.sum(log_xi), np.sum(log_xi**2)]])
b = np.array([[np.sum(log_yi)],
              [np.sum(log yi*log xi)]])
# resolvemos el sistema
a = np.linalg.solve(A,b)
print('Modelo linealizado: \ln \log(y) = \%.3f + \%.3f*\log(x)'
      % (a[0], a[1]))
```

```
Modelo linealizado:
log(y) = -1.294 + 1.984*log(x)
```

Para retornar al modelo original, aplicamos

```
y = e^{(a_0 + a_1 \ln x)}
```

```
from numpy import exp
print('Modelo no-lineal')
print('y = %.3f*x^%.3f' % (exp(a[0]), a[1]))
```

```
Modelo no-lineal
y = 0.274*x^1.984
```

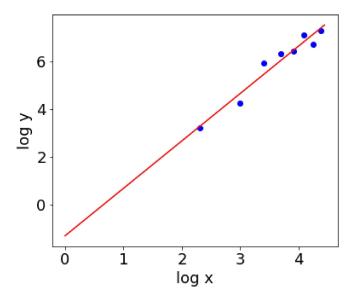
Graficamos el resultado linealizado y sin linealizar

```
from numpy import exp

# reconstrumimos el modelo original con: exp(log(a)+b log(x))
y = lambda x: exp(a[0] + a[1]*log(x))
```

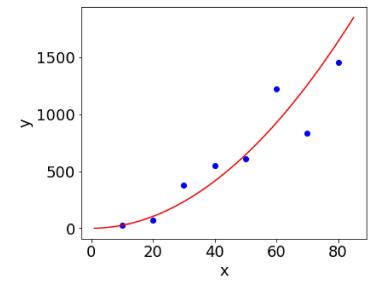
```
# modelo linealizado
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(1,85,100) # arreglo para ploteo

plt.rcParams.update({'font.size': 18})
plt.figure(figsize = (6,5))
plt.plot(log_xi, log_yi, 'bo')
plt.plot(log(x), log(y(x)), '-r')
plt.xlabel('log x')
plt.ylabel('log y')
plt.show()
```



```
# modelo original
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(1,85,100) # arreglo para ploteo

plt.rcParams.update({'font.size': 18})
plt.figure(figsize = (6,5))
plt.plot(xi, yi, 'bo')
plt.plot(x, y(x), '-r')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```



Analizamos la calidad del modelo

```
# analizamos La calidad del modelo
from sklearn.metrics import r2_score
print('coef. de determinación')
print('r2 = %.4f' % r2_score(yi,y(xi)))
```

```
coef. de determinación
r2 = 0.8088
```

El coeficiente de determinación para el modelo no-lineal ( $r^2=80.88\%$ ) es menor que para el modelo lineal ( $r^2=88.05\%$ ). Sin embargo, el modelo no-lineal se ajusta mejor al modelo físico (por ejemplo, F=0 para v=0).

Por lo tanto, el modelo de potencia:

$$y = 0.274x^{1.984}$$

es el más adecuado para los datos.

#### Otros modelos lineales

El procedimiento de ajuste de curva por mínimos cuadrados se puede extender para modelos de ajuste más complejos, tales como:

- Regresión polinomial
- Regresión lineal multivariable

#### Regresión polinomial

En su forma general, el modelo polinomial corresponde a una función univariable de la forma

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots + a_n x^n$$
 (2)

Por ejemplo, consideremos el modelo  $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$ . Según el método de regresión por mínimos cuadrados, la mejor curva está dada por el mínimo de:

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

Aplicando  $\frac{\partial S_r}{\partial a_0}=0$ ,  $\frac{\partial S_r}{\partial a_1}=0$  y  $\frac{\partial S_r}{\partial a_2}=0$ , llegamos al sistema de ecuaciones:

$$egin{bmatrix} m & \sum x_i & \sum x_i^2 \ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} egin{bmatrix} a_0 \ a_1 \ a_2 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \sum y_i \ \sum x_i y_i \ \sum x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Cuya solución nos entrega el valor de los coeficientes  $a_0$ ,  $a_1$  y  $a_2$ 

```
Modelo polinomial:

y = -178.482 + 16.122*x + 0.037*x^2
```

```
# reconstrumimos como exp(log(a)+b log(x))
y = lambda x: a[0] + a[1]*x + a[2]*x**2

# analizamos la calidad del modelo
from sklearn.metrics import r2_score

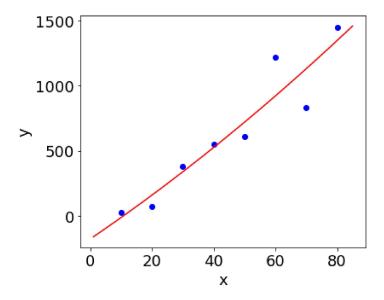
print('coef. de determinación')
print('r2 = %.4f' % r2_score(yi,y(xi)))
```

```
coef. de determinación
r2 = 0.8818
```

Notar como gráficamente el modelo sigue una tendencia casi lineal.

```
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(1,85,100) # arreglo para ploteo

plt.rcParams.update({'font.size': 18})
plt.figure(figsize = (6,5))
plt.plot(xi, yi, 'bo')
plt.plot(x, y(x), '-r')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```



Al incluir término  $a_2x^2$  en nuestro modelo lineal,  $a_0+a_1x$ , esperabamos un mejor ajsute con el modelo físico  $F_D=C_DV^2$ .

Sin embargo, la tendencia del método por minimizar el error (en otras palabras, mejorar  $r^2$ ) lleva a forzar una curva lineal que no se ajusta a la física del problema.

#### Regresión lineal multidimensional

Para problemas con más de una variable independiente se deben untilizar modelos multidimencionales. Un modelo común corresponde al modelo linear de la forma:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + \dots + a_n x_n \tag{3}$$

Por ejemplo, para dos dimensiones tenemos:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2$$

la mejor curva está dada por el mínimo de:

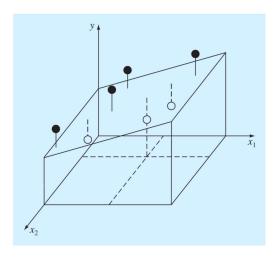
$$S_r = \sum_{i=1}^m {(y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} + a_2 x_{2,i})^2},$$

Aplicando  $\frac{\partial S_r}{\partial a_0}=0$ ,  $\frac{\partial S_r}{\partial a_1}=0$  y  $\frac{\partial S_r}{\partial a_2}=0$ , llegamos al sistema de ecuaciones:

$$egin{bmatrix} m & \sum x_{1,i} & \sum x_{2,i} \ \sum x_{1,i} & \sum x_{2,i} & \sum x_{1,i}x_{2,i} \ \sum x_{2,i} & \sum x_{1,i}x_{2,i} & \sum x_{2,i}^2 \end{bmatrix} egin{bmatrix} a_0 \ a_1 \ a_2 \end{bmatrix} = egin{bmatrix} \sum y_i \ \sum x_{1,i}y_i \ \sum x_{2,i}y_i \end{bmatrix}$$

Cuya solución nos entrega el valor de los coeficientes  $a_0$ ,  $a_1$  y  $a_2$ 

Gráficamente, el método de regresión por mínimos cuadrados corresponde a determinar el plano que minimice el error cuadrático.



## Regresión por mínimos cuadrados generalizado

#### Modelo lineal generalizado

Todos los modelos revisados anteriormente pertenecen a un modelo lineal general con la forma:

$$y = a_0 z_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2 + \dots + a_n z_n, \tag{4}$$

donde  $z_0, z_1, \ldots, z_n$  son funciones base.

Por ejemplo:

modelo	$z_0$	$z_1$	$z_2$
linear unidimensional	1	x	
polinomial	1	x	$x^2$
linear multidimensional	1	$x_1$	$x_2$

El término "lineal" hace referencia al tipo de dependencia entre las funciones base. Tal como sucede con el modelo polinomial, las funciones base  $z_i$  pueden ser no-lineales. Por ejemplo, sinusoides:

$$y = a_0 + a_1 \cos(x) + a_1 \sin(x) + a_3 \cos(2x) + a_4 \sin(2x) \dots,$$

#### Regresión por mínimos cuadrados

En general, se busca minimizar el error:

$$S_r = \sum_{i=1}^m (y(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^m \left[ \sum_{j=1}^n a_j z_j(x_i) - y_i \right]^2.$$
 (5)

Se puede demostrar que la minimización de este error está dado por la solución del sistema:

$$Z^T Z \alpha = Z^T Y \tag{6}$$

donde:

$$Z = egin{bmatrix} z_0(x_1) & z_1(x_1) & \cdots & z_n(x_1) \ z_0(x_2) & z_1(x_2) & \cdots & z_n(x_2) \ dots & dots & \ddots & dots \ z_0(x_m) & z_1(x_m) & \cdots & z_n(x_m) \end{bmatrix}; \qquad lpha = egin{bmatrix} a_0 \ a_1 \ dots \ a_n \end{bmatrix}; \qquad Y = egin{bmatrix} y_1 \ y_2 \ dots \ y_m \end{bmatrix}$$

La solución está dada por  $lpha = \left(Z^TZ\right)^{-1}Z^TY$ .

La matriz  $\left(Z^TZ\right)^{-1}Z^T$  se conoce como **matriz pseudo-inversa** 

#### Mínimos cuadrados en python

Analicemos distintos métodos en python para ajustar el modelo de ajuste para el experimento del tunel de viento

#### numpy.linalg.pinv (matriz pseudo inversa)

Una forma directa de encontrar los coeficientes del modelo de regresión es determinando la matriz pseudo inversa directamente

Consideremos un modelo lineal,  $y = a_0 + a_1 x$  para el ejemplo del tunel de viento.

La matriz Z en este caso es:

$$Z = egin{bmatrix} 1 & x_1 \ 1 & x_2 \ dots & dots \ 1 & x_m \end{bmatrix}$$

```
import numpy as np
from numpy.linalg import pinv # pseudo-inverse

# recopilación de la muestra
xi = np.array([ 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80])
yi = np.array([ 25, 70, 380, 550, 610, 1220, 830, 1450])

# construimos la matriz Z en base al modelo a0 + a1*x
Z = np.vstack((xi**0, xi**1)).T

# matriz pseudo-inversa (A^T*A)^(-1)*A^T
a = np.dot(pinv(Z),yi)
print('Modelo lineal: y = %.3f + %.3f*x' % (a[0], a[1]))
```

```
Modelo lineal: y = -234.286 + 19.470*x
```

La función numpy.vstack genera una matriz  $k \times N$ , considerando k arreglos 1D con N elementos cada uno. Es la forma más segura de apilar vectores fila (ver documentación  $\underline{ac\acute{a}}$ ).

## numpy.linalg.lstsq (solución de sistemas lineales por mínimos cuadrados)

Es un método general para resolver sistemas lineales de la forma Ax=b, independiente la relación entre el número de ecuaciones linealmente independientes y el número de incognitas (es decir, sistemas  $\operatorname{rank}\left([A|b]\right) \neq \operatorname{rank}\left(A\right)$ ). Se basa en minimizar la norma de Frobenius  $\|Ax-b\|$ .

La función 1stsq genera más de un output (ver documentación <u>acá</u>). Para conceptos del modelo de ajuste, solo necesitamos el primer output [0]

```
import numpy as np
from numpy.linalg import lstsq

# construimos el modelo
xi = np.array([ 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80])
yi = np.array([ 25, 70, 380, 550, 610, 1220, 830, 1450])

# construimos la matriz Z en base al modelo a0 + a1*x
Z = np.vstack((xi**0, xi**1)).T

a = np.linalg.lstsq(Z, yi, rcond=None)[0]
print('Modelo lineal: y = %.3f + %.3f*x' % (a[0], a[1]))
```

```
Modelo lineal: y = -234.286 + 19.470*x
```

## numpy.polyfit (sistemas polinomiales de unidimencionales)

Esta función está especificamente diseñada para modelos polinomiales de una dimensión, es decir,  $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots a_nx^n$ 

Los coeficientes de polyfit están ordenados de mayor potencia a menor potencia.

Por ejemplo, para generar un modelo en base a un polinomio de orden 2,

```
a = numpy.polyfit(xi,yi,2) # coeficientes a0, a1, a2, ...
```

```
donde a_0 = a[2], a_1 = a[1], a_2 = a[0]
```

Para evitar confusiones con el orden de los coeficientes, **se recomienda utilizar** numpy.polyval(a,x) para genera una función en base al modelo determinado, donde x es un valor arbitrario y a son los coeficientes determinados por polyfit.

```
y = numpy.polyval(a,x) # función en base al modelo y(x) = a0 + a1*x + ... am*x^m
```

```
import numpy as np

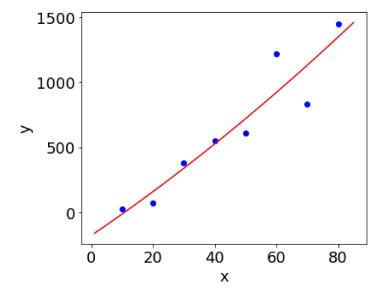
# construimos el modelo
xi = np.array([ 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80])
yi = np.array([ 25, 70, 380, 550, 610, 1220, 830, 1450])

# Aplicamos modelo polinomial con polyfit
a = np.polyfit(xi,yi,2)
print('Modelo polinomial:')
print('y = %.3f + %.3f*x + %.3f*x^2' % (a[2], a[1], a[0]))
```

```
Modelo polinomial:
y = -178.482 + 16.122*x + 0.037*x^2
```

```
# evaluamos el modelo con polyval
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(1,85,100) # arreglo para ploteo

plt.rcParams.update({'font.size': 18})
plt.figure(figsize = (6,5))
plt.plot(xi, yi, 'bo')
plt.plot(x, np.polyval(a,x), '-r') # y(x) con polyval
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```



#### scipy.optimize.curve\_fit (regresión no-lineal)

Esta función utiliza un método iterativo para ajustar una curva a una muestra. La función curve\_fit puede ser utilizada para cualquier tipo de modelo, linear o no-linear, unidimensional o multidimensional.

La función entrega una serie de outputs (ver documentación <u>acá</u>). Sin embargo, para determinar los coeficientes solo necesitamos el output [0]

Por ejemplo, ajustemos los datos al modelo  $y=lpha x^eta$ 

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

xi = np.array([ 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80])
yi = np.array([ 25, 70, 380, 550, 610, 1220, 830, 1450])

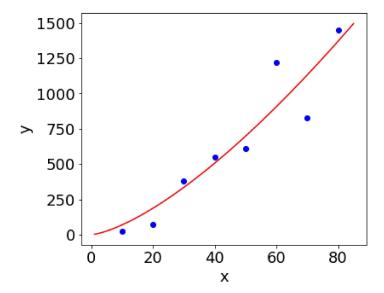
# definimos nuestro modelo en formato de función
def model(x,a,b):
    y = a*x**b
    return y

a = curve_fit(model, xdata = xi, ydata = yi)[0]
print('Modelo no-lineal')
print('y = %.3f*x^%.3f' % (a[0], a[1]))
```

```
Modelo no-lineal
y = 2.538*x^1.436
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(1,85,100) # arreglo para ploteo

plt.rcParams.update({'font.size': 18})
plt.figure(figsize = (6,5))
plt.plot(xi, yi, 'bo')
plt.plot(x, model(x,a[0],a[1]), '-r')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.show()
```



Notar que los coeficientes de este modelo son diferentes a los que determinamos mediante regresión lineal en la función linealizada.

$$y = 0.274x^{1.984} \quad (r^2 = 80.88\%)$$

Esto es debido a que la regresión no-lineal busca minimizar el error

$$S_r = \sum_{i=1}^m (f_{
m nl}(x_i) - y_i)^2,$$

de forma iterativa, y sin linealizar el modelo no-lineal  $f_{\rm nl}(x)$ . Así, curve\_fit permite buscar soluciones con valores  $r^2$  más cercanos a 1 que no son accesibles para el modelo lineal

En efecto, si analizamos el coeficiente de determinación del modelo generado por curve fit:

```
from sklearn.metrics import r2_score
print('coef. de determinación')
print('r2 = %.4f' % r2_score(yi,model(xi,a[0],a[1])))
```

```
coef. de determinación
r2 = 0.8769
```

En el caso de un modelo lineal, ambos métodos generan el mismo modelo

```
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit

xi = np.array([ 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80])
yi = np.array([ 25, 70, 380, 550, 610, 1220, 830, 1450])

def model(x,a,b):
    y = a+ b*x
    return y

a = curve_fit(model, xdata = xi, ydata = yi)[0]
print('Modelo lineal: y = %.3f + %.3f*x' % (a[0], a[1]))
```

```
Modelo lineal: y = -234.286 + 19.470*x
```

#### Regresión lineal vs no-lineal

Respecto a la regresión no-lineal:

#### Ventajas

- Permite trabajar con modelos más generales.
- Para modelos no-lineales, el método produce curvas con mejores coeficientes de determinación en comparación con modelos lineales en base a linealización.

#### **Desventajas**

• Como todo método iterativo, el metodo puede sufrir problemas de inestabilidad condicionados al modelo propuesto,  $f_{\rm nl}(x)$ . Esto puede derivar en problemas de convergencia, soluciones locales, o sensibilidad a los valorse iniciales.

En general, se recomienda **utilizar scipy.optimize.curve\_fit**, u otros métodos de ajuste no-lineal, **exclusivamente para modelos no-lineales**.

#### Referencias

- Kong Q., Siauw T., Bayen A. M. **Chapter 16: Least Square Regression** in <u>Python Programming and Numerical Methods A Guide for Engineers and Scientists</u>, 1st Ed., Academic Press, 2021
- Chapra S., Canale R. **Capítulo 17: Regresión por mínimos cuadrados** en *Métodos Numéricos para Ingenieros*, 6ta Ed., McGraw Hill, 2011

By Francisco V. Ramirez-Cuevas © Copyright 2022.