4.3 Aproximación por mínimos cuadrados.

Como ya hemos dicho anteriormente la búsqueda de un modelo matemático que represente lo mejor posible a unos datos experimentales puede abordarse, entre otras, de las dos formas siguientes:

1. Mediante interpolación (vista anteriormente);
2. mediante la obtención de una curva, $y = \phi(x)$, que se aproxime a los datos sin que, necesariamente, pase por ellos.

El caso **2** es el que a continuación abordamos. Para precisar el método a utilizar hemos de tener en consideración dos aspectos de importancia:

- ¿Qué clase de función usaremos?
- ¿Cuál es el criterio de aproximación que se utiliza?

En la práctica habitualmente se usan funciones polinómicas de grado bajo, o bien de tipo exponencial, potencial, e incluso en la actualidad funciones tipo spline o polinomios a trozos. En cuanto al criterio a considerar para obtener el modelo concreto consiste, geométricamente, en hacer mínima la suma de los cuadrados de las longitudes (distancia euclídea) L_i (ver Figura 4.9).

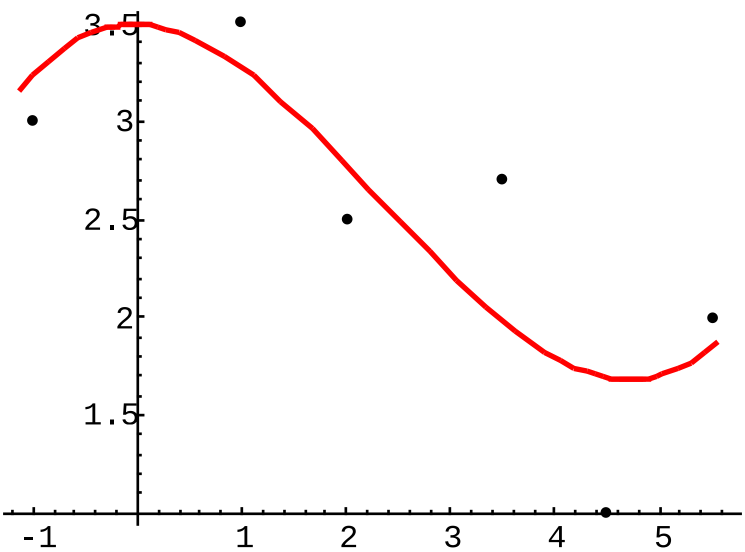

Figura 4.9

Así, el problema quedaría planteado en los términos siguientes:

Dados los datos $\{(x_i, y_i) \quad i = 1, 2, \ldots, N\}$ hallar $\phi(x)$ que verifique:

$$\boxed{\sum_{i=1}^{N} (y_i - \phi(x_i))^2 = \text{Mínima}} \tag{4.18}$$

La expresión (4.18) dependerá de parámetros a, b,... según la forma de $\phi(x)$ que se han de obtener a partir del requisito impuesto. Además, una solución del problema anterior recibe el nombre de **ajuste mínimos cuadrados de los datos.**

Dependiendo del modelo de función $\phi(x)$ utilizado aparecen distintos tipos de ajuste.

A) MODELOS LINEALES

Los modelos lineales son aquellos que utilizan funciones $\phi(x)$ de la forma:

$$\boxed{\phi(x) = a_1 q_1(x) + a_2 q_2(x) + \cdots + a_m q_m(x)} \tag{4.19}$$

donde $a_i \quad i = 1,,,,,m$ (normalmente, $\boldsymbol{m \ll N}$=número de datos) son los parámetros a determinar en el problema de ajuste, y $q_i(x) \quad i = 1,,,,,m$ son funciones linealmente independientes de cierto espacio de funciones (polinomios, spline, etc.).

Como casos particulares de ajustes de este tipo tenemos:

1. **Ajuste lineal** (recta de mínimos cuadrados) si utilizamos: $\boxed{\phi(x) = a + bx}$.
2. **Ajuste polinomial** si utilizamos el modelo: $\boxed{\phi(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_k x^k}$ (llamado cuadrático o cúbico para k=2 ó 3).
3. **Ajuste con spline lineal (1 nodo interior x*)** si utilizamos el modelo:

$$\boxed{\phi(x) = a_0 + a_1 x + a_3 (x - x^*)_+}$$

El nodo puede ser o no uno de los nodos x_k

B) MODELOS NO LINEALES

Los modelos lineales son aquellos que utilizan funciones $\phi(x)$ que no son lineales respecto los parámetros del ajuste. Algunos modelos clásicos son:

1. **Ajuste exponencial** cuando usamos el modelo: $\boxed{\phi(x) = ae^{bx}}$.
2. **Ajuste potencial** si se toma $\boxed{\phi(x) = ax^b}$.
3. **Ajuste racional** si se considera un modelo del tipo: $\boxed{\phi(x) = \dfrac{1}{a + bx}}$.

4.3.1 Ajuste Lineal clásico.

Consideramos un modelo de la forma $\phi(x) = a + bx$ con a, b ctes a determinar. En tal caso hemos de conseguir hacer mínima la función de a y b siguiente:

$$\boxed{F(a,b) = \sum_{i=1}^{N}\left(y_i - a - bx_i\right)^2} \tag{4.20}$$

Teorema 4.1

Si los nodos x_i $\mathrm{i} = 1,\ldots,\mathrm{N}$ *no todos son iguales, entonces el mínimo de* $F(a,b)$ *se obtiene para los valores de a y b que son solución del S.E.L. siguiente:*

$$\left.\begin{aligned} Na + \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)b &= \sum_{i=1}^{N} y_i \\ \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)a + \left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right)b &= \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \end{aligned}\right\} \tag{4.21}$$

Observación 4.4

El S.E.L (4.21) puede representarse, matricialmente, como sigue:

Observe que el modelo está asociado a las funciones básicas $\{1,x\}$ *(linealmente independientes);*

1. *Formamos la matriz asociada a ellas (1 columna para cada función) y a los nodos* (x_i *):*

$$M = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{pmatrix}$$

2. *Entonces,* ***(4.21)*** *coincide con el sistema matricial:* $\boxed{\left(M^t M\right)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M^t \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}}$

La técnica descrita en la observación anterior puede aplicarse, de forma más general, para un ajuste polinomial , mediante spline, o de la forma (4.19) sin más que modificar la matriz M y el vector de incógnitas.

Para precisar esto, se tendrá:

1. Para el modelo de spline lineal $\phi(x) = a_0 + a_1 x + a_3 (x - x^*)_+$ se tiene:

$$\boxed{M = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & (x_1 - x^*)_+ \\ 1 & x_2 & (x_2 - x^*)_+ \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_N & (x_N - x^*)_+ \end{pmatrix} \Rightarrow \text{el sistema es: } M^t M \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = M^t \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}}$$

2. Si el modelo fuese $\phi(x) = a_0 + a_1 x^2$ entonces:

$$\boxed{M = \begin{pmatrix} 1 & x_1^2 \\ 1 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N^2 \end{pmatrix} \Rightarrow \text{el sistema es:} \quad M^t M \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M^t \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}}$$

3. En general, si $\phi(x) = a_1 q_1(x) + a_2 q_2(x) + \cdots + a_m q_m(x)$ entonces:

$$\boxed{\begin{gathered} M = \left(\begin{array}{c|c|c|c} \underset{\text{en los nodos}}{q_1} & \underset{\text{en los nodos}}{q_2} & \cdots & \underset{\text{en los nodos}}{q_m} \end{array} \right) \Rightarrow \text{el sistema es:} \\ M^t M \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = M^t \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \end{gathered}}$$

Ejemplo 4.8

La longitud de una varilla, L, está ligada a la temperatura, T, por el modelo lineal $L = a + bT$. *Calculamos el ajuste lineal mínimos cuadrados para datos:*

$T_i(grados)$	20	40	50	60
$L_i(mm.)$	1000.22	1000.65	1000.9	1001.05

En este caso la matriz se forma para las funciones $\{1,\ T\}$; es decir:

$$M=\begin{pmatrix}1 & 20\\ 1 & 40\\ 1 & 50\\ 1 & 60\end{pmatrix}\quad \text{de donde el sistema será:}$$

$$\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 20 & 40 & 50 & 60\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 20\\ 1 & 40\\ 1 & 50\\ 1 & 60\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 20 & 40 & 50 & 60\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1000.22\\ 1000.65\\ 1000.9\\ 1001.05\end{pmatrix}$$

es decir: $\boxed{\begin{aligned}4a+170b&=4002.82\\ 170a+8100b&=170138.4\end{aligned}}$ *cuya solución es:* $a=999.804,\quad b=0.0212$.

Por lo tanto,

$$\boxed{L(T)=999.804+0.0212T}$$

Ejemplo 4.9

Ajuste por mínimos cuadrados los datos:

x_i	1	2	3	4	5
y_i	2	3	5	7	3

usando un spline lineal del tipo: $\phi(x)=a_1+a_2x+a_3(x-4)_+$ (el espacio considerado es: $S(1,0;\{1,4,5\})$.

Solución

Formamos la matriz M; es decir.

$$M=\begin{pmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 2 & 0\\ 1 & 3 & 0\\ 1 & 4 & 0\\ 1 & 5 & 1\end{pmatrix}\Rightarrow \text{ el sistema es: }\begin{pmatrix}5 & 15 & 1\\ 15 & 55 & 5\\ 1 & 5 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}20\\ 66\\ 3\end{pmatrix}\quad \text{cuya solución es:}$$

$a_1=0,\ a_2=1.7,\ a_3=-5.5$. Por lo tanto, el ajuste es: $\boxed{\phi(x)=1.7x-5.5(x-4)_+}$

cuya gráfica es:

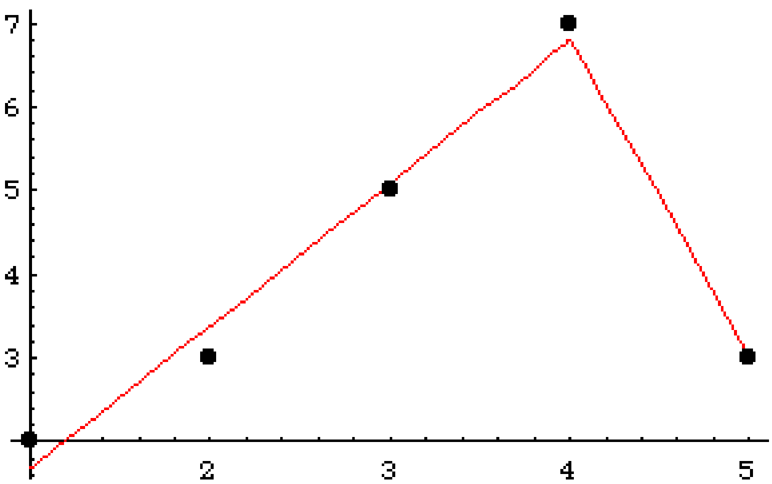

Figura 4.10 Ajuste con el spline lineal $\phi(x) = 1.7x - 5.5(x-4)_+$