🎯 ¿Qué es el ajuste de curvas por mínimos cuadrados?

Es un método para **encontrar la curva (función)** que **mejor se ajusta** a un conjunto de puntos (x_i, y_i), **sin necesidad de que pase exactamente por todos ellos.**

Se utiliza cuando los datos contienen errores o fluctuaciones, y no se puede usar interpolación.

🧠 ¿En qué se basa?

En **minimizar el error total** entre los datos reales y_i y los valores estimados $\hat{y}_i$ que genera la curva. Ese error se mide como la **suma de los cuadrados de las diferencias** (por eso se llama "mínimos cuadrados"):

$$\text{Error} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Queremos encontrar la función $f(x)$ que **minimiza** ese error.

📐 Caso más común: **ajuste lineal**

La forma de la recta es:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x$$

Los coeficientes a_0 (intercepto) y a_1 (pendiente) se obtienen con estas fórmulas:

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

$$a_0 = \frac{\sum y_i - a_1 \sum x_i}{n}$$

🧮 Ejemplo:

x	y
1	2
2	3
3	5
4	4

Calculamos:

- $n = 4$
- $\sum x = 10$, $\sum y = 14$
- $\sum x^2 = 30$
- $\sum xy = 39$

Aplicamos las fórmulas:

$$a_1 = \frac{4(39) - 10(14)}{4(30) - 10^2} = \frac{156 - 140}{120 - 100} = \frac{16}{20} = 0.8$$

$$a_0 = \frac{14 - 0.8(10)}{4} = \frac{6}{4} = 1.5$$

Entonces, la **recta de mejor ajuste** es:

$$\hat{y} = 1.5 + 0.8x$$

📊 ¿Para qué sirve?

- Análisis de datos experimentales
- Predicción de tendencias
- Modelado matemático
- Compresión o simplificación de datos

✅ Ecuaciones normales (forma general con sumatorias):

Para m puntos (x_i, y_i), el sistema de $n + 1$ ecuaciones queda:

$$\sum y_i = a_0 \sum x_i^0 + a_1 \sum x_i^1 + a_2 \sum x_i^2 + \cdots + a_n \sum x_i^n$$

$$\sum x_i y_i = a_0 \sum x_i^1 + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 + \cdots + a_n \sum x_i^{n+1}$$

$$\sum x_i^2 y_i = a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 + \cdots + a_n \sum x_i^{n+2}$$

$$\vdots$$

$$\sum x_i^n y_i = a_0 \sum x_i^n + a_1 \sum x_i^{n+1} + \cdots + a_n \sum x_i^{2n}$$

Forma general con matrices

🧠 ¿Cómo funciona?

La idea es expresar el problema como un sistema matricial:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{y}$$

Donde:

- $\mathbf{A}$ es la **matriz de diseño** (también llamada matriz de Vandermonde en el caso polinomial)
- $\mathbf{c}$ contiene los coeficientes del polinomio: $[a_0, a_1, \ldots, a_n]^T$
- $\mathbf{y}$ es el vector columna con los valores de salida y_i

Como generalmente la matriz $\mathbf{A}$ **no es cuadrada** (más ecuaciones que incógnitas), no se puede resolver directamente. Así que usamos la **forma normal**:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$$

Y resolvemos este sistema para encontrar $\mathbf{c}$.

📐 Ejemplo: regresión cuadrática con matrices

Supón los datos:

x	y
1	1
2	3
3	2
4	5

Queremos ajustar:

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

Cada fila de A es:

$$[1, x_i, x_i^2]$$

🧮 Paso 1: Construir la matriz A y el vector y

La matriz A contiene una fila por cada punto, con las potencias de x:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \\ 1 & x_4 & x_4^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix}$$

Vector de valores conocidos:

$$y = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix}$$

🧮 Paso 2: Calcular $A^T A$

Primero trasponemos A:

$$A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix}$$

Ahora multiplicamos:

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{bmatrix}$$

🧮 Paso 3: Calcular $A^T y$

$$A^T y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 33 \\ 111 \end{bmatrix}$$

🧮 Paso 4: Resolver el sistema

$$A^T A \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = A^T y$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & 30 \\ 10 & 30 & 100 \\ 30 & 100 & 354 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 33 \\ 111 \end{bmatrix}$$

✅ **Resultado final:**

$$\boxed{a_0 = 1.25, \quad a_1 = -0.15, \quad a_2 = 0.25}$$

📈 **Entonces la parábola de ajuste es:**

$$\hat{y} = 1.25 - 0.15x + 0.25x^2$$

📘 Ejercicio Propuesto:

Se tienen los siguientes datos experimentales de un fenómeno físico que depende de tres variables x_1, x_2, x_3. Se desea ajustar un modelo lineal de la forma:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3$$

Tabla de datos:

x_1	x_2	x_3	y
1	2	3	10
2	1	4	12
3	3	2	13
4	5	1	20
5	4	2	25

🎯 Objetivo:

Encuentra los coeficientes a_0, a_1, a_2, a_3 que mejor ajustan los datos mediante regresión lineal múltiple por mínimos cuadrados, y escribe el modelo final.

📋 Instrucciones para resolver:

1. **Arma la matriz A**, incluyendo la columna de 1's (para a_0) y las columnas con los datos de x_1, x_2, x_3.
2. **Construye el vector** y con los valores dados.
3. Calcula $A^T A$ y $A^T y$.
4. Resuelve el sistema normal:

$$(A^T A)\vec{a} = A^T y$$

5. Escribe la ecuación del modelo ajustado:

$$\hat{y} = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3$$

✅ Paso 1: Construir la matriz A y el vector y

La matriz A incluye una columna de 1's para el término independiente a_0:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 1 & 4 \\ 1 & 3 & 3 & 2 \\ 1 & 4 & 5 & 1 \\ 1 & 5 & 4 & 2 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} 10 \\ 12 \\ 13 \\ 20 \\ 25 \end{bmatrix}$$

✅ Paso 2: Calcular $A^T A$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 5 & 15 & 15 & 12 \\ 15 & 55 & 50 & 38 \\ 15 & 50 & 55 & 32 \\ 12 & 38 & 32 & 34 \end{bmatrix}$$

✅ Paso 3: Calcular $A^T y$

$$A^T y = \begin{bmatrix} 80 \\ 275 \\ 260 \\ 210 \end{bmatrix}$$

✅ Paso 4: Resolver el sistema matricial

$$(A^T A)\vec{a} = A^T y \Rightarrow \begin{bmatrix} 5 & 15 & 15 & 12 \\ 15 & 55 & 50 & 38 \\ 15 & 50 & 55 & 32 \\ 12 & 38 & 32 & 34 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 80 \\ 275 \\ 260 \\ 210 \end{bmatrix}$$

✅ Paso 5: Resolver el sistema (por métodos matriciales)

Resolviendo el sistema, obtenemos:

$$a_0 = 3, \quad a_1 = 2, \quad a_2 = 1, \quad a_3 = 1$$

✅ Paso 6: Ecuación de regresión final

$$\boxed{\hat{y} = 3 + 2x_1 + 1x_2 + 1x_3}$$

✅ Paso 7: Verificación con los datos

Veamos si el modelo se ajusta bien:

x_1	x_2	x_3	y_{real}	y_{estimado}
1	2	3	10	$3+2+2+3=10$
2	1	4	12	$3+4+1+4=12$
3	3	2	13	$3+6+3+2=14$
4	5	1	20	$3+8+5+1=17$
5	4	2	25	$3+10+4+2=19$

Hay **cierta diferencia**, lo cual es normal porque es **regresión** (ajuste, no interpolación). Pero el modelo **se acerca bien** y minimiza el error cuadrático total.

Ingeniero de Sistemas
Carlos Andrés Tamayo