Metodo de minimos cuadrados

José Ramón Pérez Navarro

Noviembre, 2019

0.1. Definición

En su forma lineal el método de mínimos cuadrados se usa para demostrar la base teórica del método. En su forma general, el método de mínimos cuadrados se basa en una función aproximada, la cual depende linealmente de un conjunto de parámetros $a_0, a_1, ... a_n$. La integral de la suma del cuadrado de los errores está dada por:

$$S = \int_{a}^{b} [f(x) - \phi(a_0, a_1, ...a_n, x)]^2$$

Debido a que se requiere que S sea lo más pequeño posible, la primera derivada con respecto a los coeficientes debe ser cero esto es:

$$\frac{\partial S}{\partial a_i} = 0, \quad i = 0, ..., n$$

Si las condiciones apropiadas se cumplen para a diferenciación dentro de la integral, entonces ésta se reduce a n+1 ecuaciones para los coeficientes $a_1.Portantosetieneque$

$$-2\int_{a}^{b} \frac{\partial \phi}{\partial a_{1}} [f(x) - \phi(a_{0}, a_{1}, ..., a_{n}, x)] dx = 0,$$

como ϕ es función lineal de los coeficientes, los términos de esta ecuación son constantes. Entonces la ecuación se puede escribir como

$$\int_{a}^{b} \frac{\partial \phi}{\partial a_{i}} \phi(a_{0}, a_{1}, ..., a_{n}, x) dx = \int_{a}^{b} \frac{\partial \phi}{\partial a_{1}} f(x) dx, \quad i = 0, 1, ..., n$$

Esta ecuación se conoce como "la forma de la ecuación". Para ilustrar de manera simple el método, considere el caso de una aproximación polinomial,

$$\phi(a_0, a_1, ..., a_n, x)dx = a_0 + a_1x + ... + a_nx^n$$

la forma normal de esta ecuación es

$$\int_{a}^{b} x^{i} [a_{0} + a_{1}x... + a_{n}x^{n}] dx = \int_{a}^{b} x^{i} f(x) dx, \quad i = 0, 1, ..., n$$

Si se desarrollan estas ecuaciones, se obtiene

$$u_{00}a_0 + u_{01}a_1 + \dots + u_{0n}a_n = b_0$$

$$\dots$$

$$u_{n0}a_0 + u_{n1}a_1 + \dots + u_{0n}a_n = b_n$$

donde los coeficientes u_{ij} del lado izquierdo están dados por

$$u_{ij} = \int_{a}^{b} x_{i}.x_{j}dx, \quad i, j = 0, 1, ..., n$$

No obstante, estas ecuaciones pueden ser muy mal condicionadas y no se recomienda la solución directa del problema de mínimos cuadrados por este método. Idealmente, se querrá que la forma normal de la ecuación tome una forma simple que dé una solución eficiente al problema. La forma más simple posible es la forma diagonal, la cual permite poder encontrar los coeficientes $a_0, a_1, ... a_n$ directamente dividiendo por u_{ii} (i=0,1,...,n). Esta forma se puede obtener aprovechando las propiedades especiales de las funciones ortogonales. La propiedad fundamental de las funciones ortogonales es que, para dos términos diferentes de una sucesión ortogonal $Q_k(x)(k=0,1,...), laintegral$

$$\int_{a}^{b} w(x).Q_{i}(x).Q_{j}(x)dx = 0, \quad parai \neq j$$

Los limites a y b y la función de peso w(x) se eligen adecuadamente . En forma especifica, si se elige w(x) = 1 y a = -1. b = +1, entonces se obtienen los polinomios de Legendre, los cuales tienen la propiedad de ortogonalidad. Así, en vez de aproximar por sumas de potencias de x, se usa la suma de polinomios de Legendre de la forma

$$\phi(a_0, a_1, ..., a_n, x)dx = a_0 \bar{P}_0(x) + ... + a_n \bar{P}_n(x)$$

Los primeros polinomios de esta serie son

$$\bar{P}_x(x) = 1$$
$$\bar{P}_1(x) = x$$
$$\bar{P}_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

Haciendo la correspondencia con la ecuación anterior, ahora se tiene un conjunto con términos solamente en la diagonal, ya que:

$$u_{ij} = \int_{-1}^{+1} \bar{P}_i(x).\bar{P}_j(x)dx = 0, \quad i = 0, 1, ..., n, j \neq i$$

los coeficientes de la diagonal también toman una forma especialmente sencilla,

$$u_{ii} = \int_{-1}^{+1} [\bar{P}_i(x)]^2 dx = \frac{2}{2i+1}$$

de tal forma que los a_i se encuentran directamente

$$a_i = \frac{2i+1}{2} \int_{-1}^{+1} \bar{P}_i(x) \cdot f(x) dx, \quad i = 0, 1, ..., n$$

Si se necesita la representación como un polinomio en x, la expresión para i(x)se puede sustituir dentro de las ecuaciones una vez que se han determinado los valores de a_i , y un reagrupamiento dará el polinomio en x.

Codigo del programa

% Función para crear un polinomio de grado n que ajusta un grupo de datos utilizar % la técnica de mínimos cuadrados, a partir de los siguientes datos: x .- vector discreto de la variable independiente fx .- valor de la función en los puntos x clear all clc format long g % Vector de la variable independiente. x = [1.1]1.7 2.9 3.7 4.5]; % Valor de la función en los puntos "x".fx = [3.41 5.17 23.46 36.45 40.86]; % % Orden del polinomio que se desea crear. P = M-4; % Orden de la matriz de coeficientes. N = P+1; % Rutina para crear todos los elementos de la matriz de coeficientes. for k = 1:2 A(:,k) = a(k:N+k-1);% Rutina para crear la matriz de coeficientes. for k=1:N $Y(k,1) = sum(fx.*x.^(k-1));$ % Rutina para crear los valores de YiXi. for k=1:N % Cálculo de los coeficientes del polinomio que ajusta el grupo de datos.ck = inv % Se invierte el orden de los coeficientes para utilizar la función polyval para %% Vector a evaluar en puntos entre el límite inferior y % superior. Fxp = polyval(ck,xp);

% Gráficas de los puntos iniciales y el polinomio interpolador. plot(x,fx,'o',xp,F

% Evaluación de la función en todos los puntos propuestos.