AJUSTE DE CURVAS

Contenido

Contenido

Definiciones

- En ciencias e ingeniería es frecuente que un experimento produzca un conjunto de datos $(x_1, y_1), ..., (x_N, y_N)$, siendo las abcisas $\{x_k\}$ distintas entre sí.
- Uno de los objetivos del cálculo numérico es la determinación de una fórmula $y = f(x)$ que relacione las variables (*ajustar una curva a datos experimentales*).
- Normalmente se dispone de una serie de fórmulas previamente establecidas, y lo que hay que hallar son los valores más adecuados de unos coeficientes o unos parámetros para estas fórmulas.

Definiciones

- En ciencias e ingeniería es frecuente que un experimento produzca un conjunto de datos $(x_1, y_1), ..., (x_N, y_N)$, siendo las abcisas $\{x_k\}$ distintas entre sí.
- Uno de los objetivos del cálculo numérico es la determinación de una fórmula $y = f(x)$ que relacione las variables (*ajustar una curva a datos experimentales*).
- Normalmente se dispone de una serie de fórmulas previamente establecidas, y lo que hay que hallar son los valores más adecuados de unos coeficientes o unos parámetros para estas fórmulas.

Definiciones

- En ciencias e ingeniería es frecuente que un experimento produzca un conjunto de datos $(x_1, y_1), ..., (x_N, y_N)$, siendo las abcisas $\{x_k\}$ distintas entre sí.
- Uno de los objetivos del cálculo numérico es la determinación de una fórmula $y = f(x)$ que relacione las variables (*ajustar una curva a datos experimentales*).
- Normalmente se dispone de una serie de fórmulas previamente establecidas, y lo que hay que hallar son los valores más adecuados de unos coeficientes o unos parámetros para estas fórmulas.

Definiciones

Definición

Se definen los *errores* o *desviaciones* o *residuos* así:

$$e_k = f\left(x_k\right) - y_k;\ 1 \leq k \leq N.$$

Se definen las siguientes normas que se pueden usar con los residuos para medir la distancia entre la curva $y = f(x)$ y los datos:

Error Máximo:

$$E_\infty(f) = \max\left\{\left|f\left(x_k\right) - y_k\right| : 1 \leq k \leq N\right\},$$

Definiciones

Error Medio:

$$E_1(f) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left| f\left(x_k\right) - y_k \right| ,$$

Error Cuadrático Medio:

$$E_2(f) = \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left| f\left(x_k\right) - y_k \right|^2 \right)^{1/2} . \tag{1}$$

Contenido

Rectas de Regresión en Mínimos Cuadrados

Definición

Sea $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{N}$ un conjunto de N puntos cuyas abcisas $\{x_k\}$ son todas distintas. La *recta de regresión* o *recta óptima en (el sentido de los) mínimos cuadrados* es la recta de ecuación $y = f(x) = Ax + B$ que minimiza el error cuadrático medio $E_2(f)$.

Rectas de Regresión en Mínimos Cuadrados

De (1), notar que $E_2(f)$ será mínima sii lo es

$$N\left(E_2(f)\right)^2 = \sum_{k=1}^{N} (Ax_k + B - y_k)^2 .$$

Geométricamente es la suma de los cuadrados de las distancias verticales desde los puntos $\{(x_k, y_k)\}$ hasta la recta $y = Ax + B$.

Rectas de Regresión en Mínimos Cuadrados

Teorema: Recta de Regresión en Mínimos Cuadrados

Sean $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{N}$ N puntos cuyas abcisas $\{x_k\}_{k=1}^{N}$ son distintas. Entonces, los coeficientes de la recta de regresión

$$y = Ax + B$$

son la solución del siguiente sistema lineal, conocido como las *ecuaciones normales de Gauss*:

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{k=1}^{N} x_k^2\right) A + \left(\sum_{k=1}^{N} x_k\right) B &= \sum_{k=1}^{N} x_k y_k, \\
\left(\sum_{k=1}^{N} x_k\right) A + NB &= \sum_{k=1}^{N} y_k.
\end{aligned}$$

Contenido

El Ajuste Potencial $y = Ax^M$

Algunas situaciones se modelan mediante una función del tipo $f(x) = Ax^M$, donde M es una constante conocida. En estos casos solo hay que determinar un parámetro.

El Ajuste Potencial $y = Ax^M$

Teorema: Ajuste Potencial

Supongamos que tenemos N puntos $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{N}$ cuyas abcisas son distintas. Entonces, el coeficiente A de la curva potencial óptima en mínimos cuadrados $y = Ax^M$ viene dado por

$$A = \frac{\left(\sum_{k=1}^{N} x_k^M y_k\right)}{\left(\sum_{k=1}^{N} x_k^{2M}\right)}.$$

Contenido

El Ajuste Exponencial $y = Ce^{Ax}$

Se desea ajustar una curva exponencial de la forma

$$y = Ce^{Ax} \tag{2}$$

a un conjunto de puntos $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{N}$ dado de antemano.

Opción 1: El método de linealización de los datos

Tomando logaritmos en (2):

$$\ln(y) = Ax + \ln(C).$$

Haciendo un cambio de variables (y de constante):

$$Y = \ln(y),\ X = x,\ B = \ln(C),$$

se obtiene una relación lineal entre las nuevas variables X y Y:

$$Y = AX + B. \tag{3}$$

Opción 1: El método de linealización de los datos

Tomando logaritmos en (2):

$$\ln(y) = Ax + \ln(C).$$

Haciendo un cambio de variables (y de constante):

$$Y = \ln(y),\ X = x,\ B = \ln(C),$$

se obtiene una relación lineal entre las nuevas variables X y Y:

$$Y = AX + B. \tag{3}$$

Opción 1: El método de linealización de los datos

Tomando logaritmos en (2):

$$\ln(y) = Ax + \ln(C).$$

Haciendo un cambio de variables (y de constante):

$$Y = \ln(y),\ X = x,\ B = \ln(C),$$

se obtiene una relación lineal entre las nuevas variables X y Y:

$$Y = AX + B. \tag{3}$$

Opción 1: El método de linealización de los datos

Ahora se calcula la recta de regresión (3) para los puntos $\{(X_k, Y_k)\}$, para lo que planteamos las correspondientes ecuaciones normales de Gauss

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^{N} X_k^2\right) A + \left(\sum_{k=1}^{N} X_k\right) B &= \sum_{k=1}^{N} X_k Y_k, \\ \left(\sum_{k=1}^{N} X_k\right) A + NB &= \sum_{k=1}^{N} Y_k, \end{aligned}$$

que constituyen un sistema de ecuaciones *lineales* para las incógnitas A y C. Una vez calculados A y B, hallamos el parámetro C de (2): $C = e^B$.

Opción 2: El método no lineal de los mínimos cuadrados

Se debe hallar el mínimo de la función

$$E(A, C) = \sum_{k=1}^{N} \left(Ce^{Ax_k} - y_k \right)^2 .$$

Para ello, hallamos las derivadas parciales

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial A} &= 2 \sum_{k=1}^{N} \left(Ce^{Ax_k} - y_k \right) Cx_k e^{Ax_k}, \\ \frac{\partial E}{\partial C} &= 2 \sum_{k=1}^{N} \left(Ce^{Ax_k} - y_k \right) e^{Ax_k}. \end{aligned}$$

Opción 2: El método no lineal de los mínimos cuadrados

Se debe hallar el mínimo de la función

$$E(A, C) = \sum_{k=1}^{N} \left(Ce^{Ax_k} - y_k \right)^2 .$$

Para ello, hallamos las derivadas parciales

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial A} &= 2 \sum_{k=1}^{N} \left(Ce^{Ax_k} - y_k \right) Cx_k e^{Ax_k}, \\ \frac{\partial E}{\partial C} &= 2 \sum_{k=1}^{N} \left(Ce^{Ax_k} - y_k \right) e^{Ax_k}. \end{aligned}$$

Opción 2: El método no lineal de los mínimos cuadrados

Igualando a cero obtenemos las ecuaciones normales

$$\begin{aligned} C\sum_{k=1}^{N} x_k e^{2Ax_k} - \sum_{k=1}^{N} x_k y_k e^{Ax_k} &= 0, \\ C\sum_{k=1}^{N} e^{2Ax_k} - \sum_{k=1}^{N} y_k e^{Ax_k} &= 0, \end{aligned}$$

que es un sistema de ecuaciones *no lineales* para las incógnitas A y C.

Opción 2: El método no lineal de los mínimos cuadrados

- Se puede resolver este sistema con el método iterativo de Newton-Raphson.
- Se pueden utilizar métodos para minimizar funciones de varias variables, para hallar el mínimo de la función $E(A, C)$ directamente. Por ejemplo, el de Nelder-Mead. En este caso, no se necesita calcular las derivadas parciales.

Opción 2: El método no lineal de los mínimos cuadrados

- Se puede resolver este sistema con el método iterativo de Newton-Raphson.
- Se pueden utilizar métodos para minimizar funciones de varias variables, para hallar el mínimo de la función $E(A, C)$ directamente. Por ejemplo, el de Nelder-Mead. En este caso, no se necesita calcular las derivadas parciales.

Contenido

Combinaciones Lineales en Mínimos Cuadrados

Este problema se formula así: Dados N puntos $\{(x_k, y_k)\}$ y un conjunto de M funciones linealmente independientes $\{f_j(x)\}$, encontrar M coeficientes $\{c_j\}$ tales que la función $f(x)$ definida como la combinación lineal

$$f(x) = \sum_{j=1}^{M} c_j f_j(x)$$

minimice la suma de los cuadrados de los errores

$$E(C_1, C_2, ..., C_M) = \sum_{k=1}^{N} (f(x_k) - y_k)^2 = \sum_{k=1}^{N} \left(\left(\sum_{j=1}^{M} c_j f_j(x_k) \right) - y_k \right)^2 .$$

Combinaciones Lineales en Mínimos Cuadrados

Para que E alcance un mínimo en un punto, $\{c_j\}$ debe ser la solución del sistema de ecuaciones lineales:

$$\frac{\partial E}{\partial C_i} = \sum_{k=1}^{N}\left(\left(\sum_{j=1}^{M} c_j f_j(x_k)\right) - y_k\right)(f_i(x_k)) = 0;\ i = 1, 2, ..., M$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^{M}\left(\sum_{k=1}^{N} f_i(x_k) f_j(x_k)\right) c_j = \sum_{k=1}^{N} f_i(x_k) y_k;\ i = 1, 2, ..., M, \qquad (4)$$

llamadas *ecuaciones normales de Gauss*. Es un sistema de ecuaciones lineales de orden M x M. Las incógnitas son los coeficientes $\{c_j\}$.

Formulación Matricial

Si se define

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \dots & f_M(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \dots & f_M(x_2) \\ f_1(x_3) & f_2(x_3) & \dots & f_M(x_3) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_N) & f_2(x_N) & \dots & f_M(x_N) \end{bmatrix}, \ \mathbf{F}' = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_1(x_2) & f_1(x_3) & \dots & f_1(x_N) \\ f_2(x_1) & f_2(x_2) & f_2(x_3) & \dots & f_2(x_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_M(x_1) & f_M(x_2) & f_M(x_3) & \dots & f_M(x_N) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_M \end{bmatrix}, \ \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{bmatrix},$$

entonces (4) se puede escribir como

$$\mathbf{F}'\mathbf{F}\mathbf{C} = \mathbf{F}'\mathbf{Y},$$

cuya incógnita es C.

Ajuste Polinomial

Cuando el método que se acaba de describir se aplica al caso en el que se tienen M+1 funciones dadas por $\{f_j(x) = x^{j-1}\}$, la función $f(x)$ será un polinomio de grado <= M:

$$f(x) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2 + ... + c_{M+1} x^M.$$

Ajuste Polinomial

Teorema: Parábola óptima en mínimos cuadrados

Suponer que se tienen N puntos $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^{N}$ cuyas abcisas son todas distintas. Los coeficientes de la parábola de ecuación

$$y = f(x) = Ax^2 + Bx + C$$

que mejor se ajusta a dichos puntos en el sentido de los mínimos cuadrados son las soluciones A, B y C del sistema de ecuaciones lineales

Ajuste Polinomial

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{k=1}^{N} x_k^4\right) A + \left(\sum_{k=1}^{N} x_k^3\right) B + \left(\sum_{k=1}^{N} x_k^2\right) C &= \sum_{k=1}^{N} y_k x_k^2, \\
\left(\sum_{k=1}^{N} x_k^3\right) A + \left(\sum_{k=1}^{N} x_k^2\right) B + \left(\sum_{k=1}^{N} x_k\right) C &= \sum_{k=1}^{N} y_k x_k, \\
\left(\sum_{k=1}^{N} x_k^2\right) A + \left(\sum_{k=1}^{N} x_k\right) B + NC &= \sum_{k=1}^{N} y_k.
\end{aligned}$$

Bibliografía

MATHEWS, John; KURTIS, Fink.
Métodos Numéricos con MATLAB.
Prentice Hall, 2000.