UAEM Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Nezahualcóyotl

Asignatura: Métodos numéricos

Tema: Aproximaciones por mínimos cuadrados

Ingeniería en Sistemas Inteligentes

Dra. Rosa María Rodríguez Aguilar

Directorio

DIRECTORIO UAEM

- Dr. en D. Jorge Olvera García
  Rector
- Dr Alfredo Barrera Baca
  Secretario de docencia
- Dra. Ángeles Ma. Del Rosario Pérez Bernal
  Secretaria de Investigación y Estudios Avanzados
- Mtro. José Benjamín Bernal Suárez
  Secretario de Rectoría
- Mtra. Ivett Tinoco García
  Secretaria de Difusión Cultural
- Mtro. Ricardo Joya Cepeda
  Secretario de Extensión y Vinculación
- Mtro. Javier González Martínez
  Secretario de administración
- Dr. Manuel Hernández Luna
  Secretario de Planeación y Desarrollo Institucional
- Dr. Hiram Raúl Piña Libien
  Abogado General
- Lic. en Com. Juan Portilla Estrada
  Director General de Comunicación Universitaria

DIRECTORIO DE LA UAP-NEZAHUALCÓYOTL

Dr. en C. E. Luis Ramón López Gutiérrez

Coordinador

Dr. en F.M. Israel Gutiérrez González

Subdirector Académico

Lic. Alfredo Ríos Flores

Subdirector Administrativo

Dra. en C.S. María Luisa Quintero Soto

Coordinadora de Investigación y Estudios Avanzados

Lic. en A. Víctor Manuel Durán López

Jefe de Planeación y Desarrollo Institucional

Dra. Selene Jiménez Bautista

Coordinador de la Lic. en Comercio Internacional

Dra. Georgina Contreras Landgrave

Coordinadora de la Lic. en Educación para la Salud

Dra. Dora María Calderón Nepamuceno

Coordinadora de Ingeniería en Sistemas Inteligentes

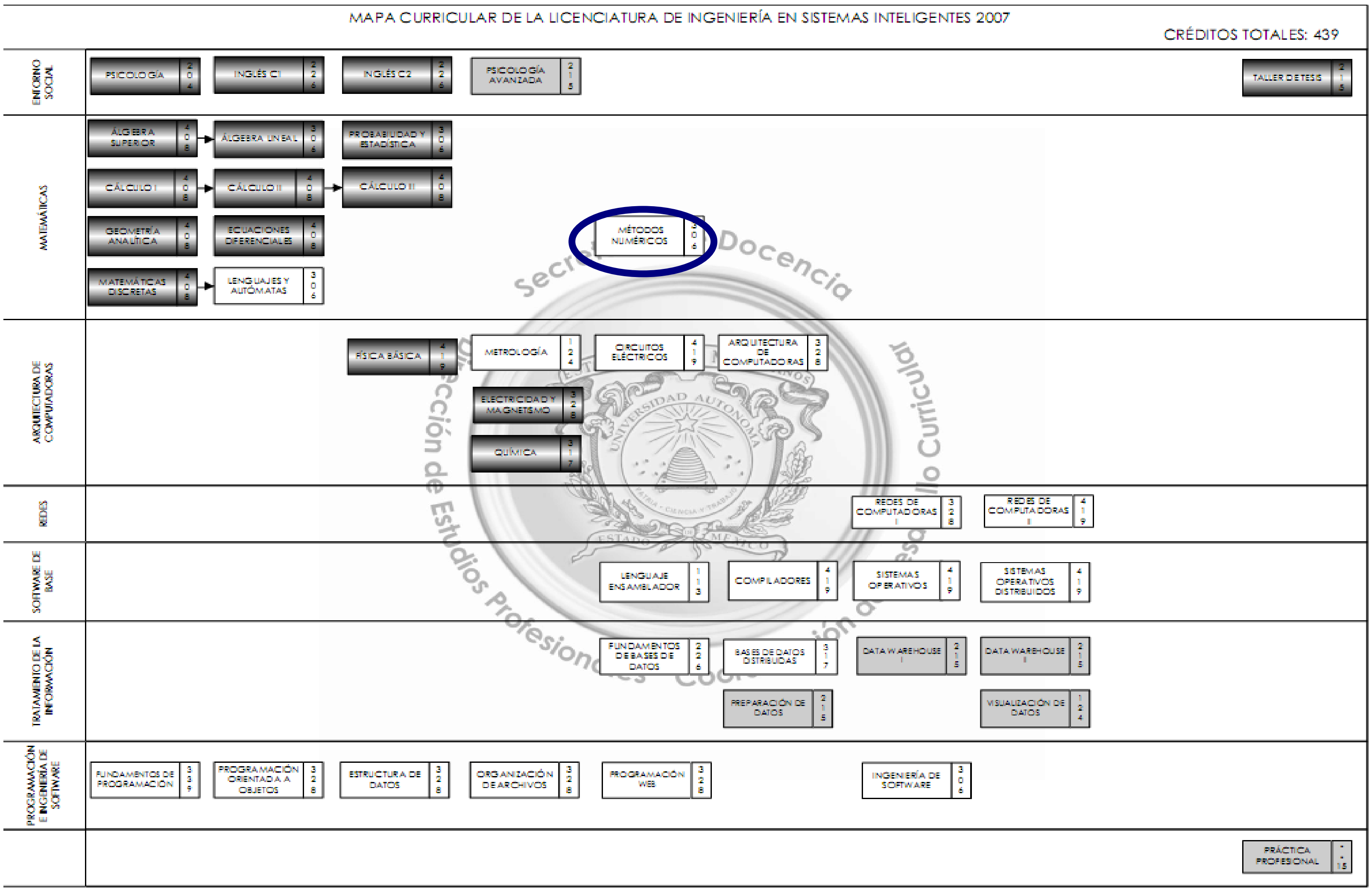
Mtro. Juan Antonio Jiménez García

Coordinador de Ingeniería en Transporte

Coordinador de Ingeniería en Transporte

2

Ubicación de la asignatura de Métodos numéricos, dentro del programa de la Lic. en Ing. en Sistemas



Contenido Sintético

Métodos numéricos

Unidad III: Ajuste de curvas

Regresión lineal por mínimos Cuadrados, caso lineal

Regresión lineal por mínimos Cuadrados, caso exponencial

PRESENTACIÓN

La unidad de aprendizaje de Métodos Numéricos es fundamental en la formación de profesionistas de la Licenciatura en Ingeniería en Sistemas Inteligentes, ya que es una herramienta indispensable en la solución numérica de problemas durante su preparación y en el ejercicio profesional en algunas áreas del conocimiento.

PRESENTACIÓN (b)

Para que los alumnos logren lo anterior se utilizaran las siguientes estrategias de enseñanza:

- exposición de los conocimientos teóricos por parte del profesor,
- planteamiento y solución de ejercicios en clase,
- series de ejercicios que el alumno resuelve fuera de clase y
- desarrollo de software para la solución de problemas específicos de esta unidad de aprendizaje.

INTRODUCCIÓN

En la búsqueda de un modelo matemático que represente lo mejor posible un conjunto de datos experimentales, los cuales puedan abordarse en su entendimiento de diferentes formas, para lo cual se proponen métodos de solución:

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

PROCEDIMIENTO

El criterio a considerar, consiste en obtener un modelo geométrico, que realice la suma de mínimos cuadrados de las longitudes (distancia euclidiana) (ver Figura siguiente).

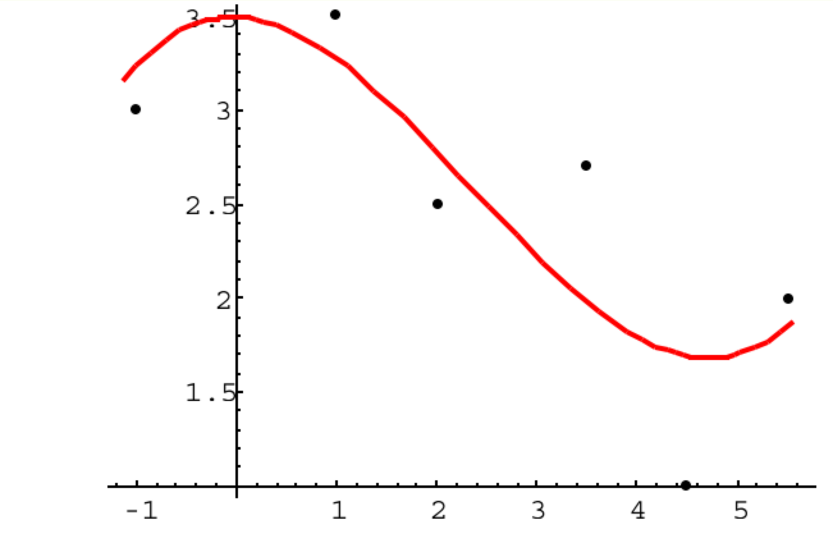


Figura1

PROCEDIMIENTO

Así, el problema quedaría planteado en los términos siguientes:
Dados los datos $\{(x_i,y_i)$ i=1,2, ,N $\}$ hallar *φ(x)* que verifique:

$$\sum_{i=1}^{N}((y_i - \phi(x_i))^2 = Minima$$

Formula 1

La fórmula anterior recibe el nombre de ajuste de mínimos cuadrados de los datos.

MODELOS LINEALES

- Los modelos lineales son aquellos que utilizan funciones *φ(x)* de la forma:

$$\varphi(x)= a_1q_1(x)+ a_2q_2(x)+ + a_mq_m(x) \qquad \text{Formula 2}$$

donde a_i i=1…..m (normalmente, m<<N=número de datos) son los parámetros a determinar en el problema de ajuste, y $q_i(x)$ i=1…..m son funciones linealmente independientes de cierto espacio de funciones (polinomios, spline, etc.). Sustituyendo el problema general de ajustar la mejor recta con mínimos cuadrados a una colección de datos queda de la siguiente manera, para minimizar el error total:

$$E = (a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{m}[y_i - (a_1x_i + a_0)]^2 \qquad \text{Formula 3}$$

MODELOS LINEALES

Para que haya un mínimo, se debe cumplir lo siguiente:

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{m}[y_i \; - (a_1 x_i + a_0)]^2 = 2\sum_{i=1}^{m}(y_i - a_1 x_i - a_0)(-1)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^{m}[y_i \; - (a_1 x_i + a_0)]^2 = 2\sum_{i=1}^{m}(y_i - a_1 x_i - a_0)(-x)$$

$$a_0 * m + a_1 \sum_{i=1}^{m} x_i = \sum_{i1}^{m} y_i \quad \text{y} \quad a_0 \sum_{i=1}^{m} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{m} x_i^2 = \sum_{i=1}^{m} x_i y_i$$

Formulas 4

MODELOS LINEALES

La solución de este sistema de ecuaciones es:

$$a_0 = \frac{\sum_{i=1}^{m} x_i^2 \sum_{i=1}^{m} y_i - \sum_{i=1}^{m} x_i y_i \sum_{i=1}^{m} x_i}{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

$$a_1 = \frac{m \sum_{i=1}^{m} x_i y_i - \sum_{i=1}^{m} x_i \sum_{i=1}^{m} y_i}{m\left(\sum_{i=1}^{m} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{m} x_i\right)^2}$$

Formulas 5

EJEMPLO

Considere el problema de estimar los valores de una función en puntos no tabulados, si se cuenta con los siguientes datos experimentales de la tabla siguiente:

X_i	y_i
1	1.3
2	3.5
3	4.2
4	5.0
5	7.0
6	8.8
7	10.1
8	12.5
9	13.0
10	15.6

Tabla 1

MODELOS LINEALES CON EXCEL

A continuación vamos a indicar un procedimiento basado en la utilización de la hoja de cálculo EXCEL, que nos facilita y agiliza todos los cálculos anteriores.

Una vez abierta la hoja de cálculo introducimos en la primera columna los valores de la variable independiente (x_i) y en la segunda columna los de la variable dependiente (y_i), esto es, los valores de x en la primera y los valores de y en la segunda columna, a continuación seleccionamos todas las celdas, este será el aspecto de nuestra hoja:

MODELOS LINEALES CON EXCEL

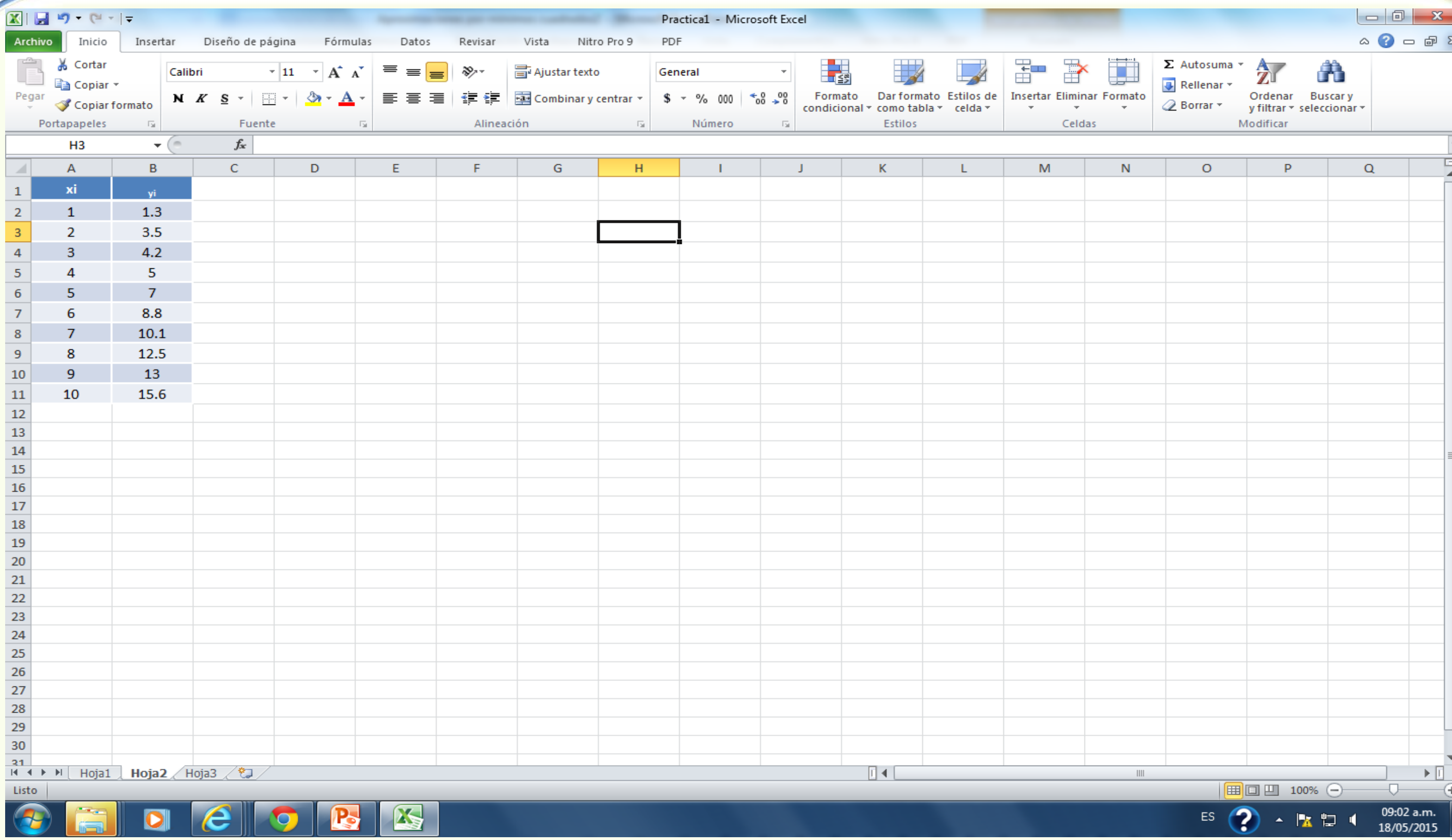


Figura 2

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Hacemos clic sobre el menú insertar en nuestra hoja de Excel como se muestra en la siguiente pantalla:

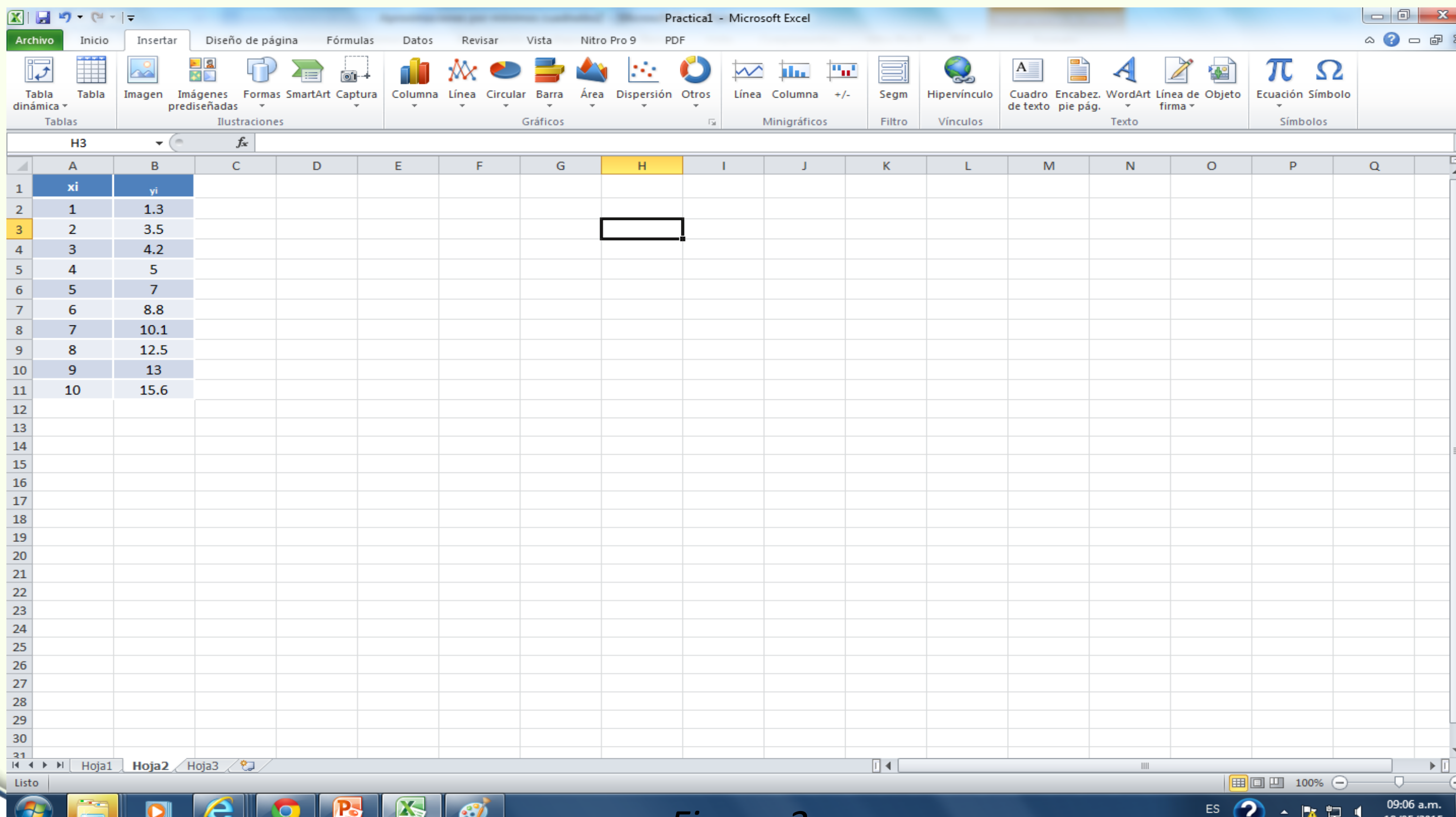


Figura 3

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Seleccionamos en la pestaña gráficos, el XY (Dispersión) y en Subtipo el que considere más adecuado y de clip:

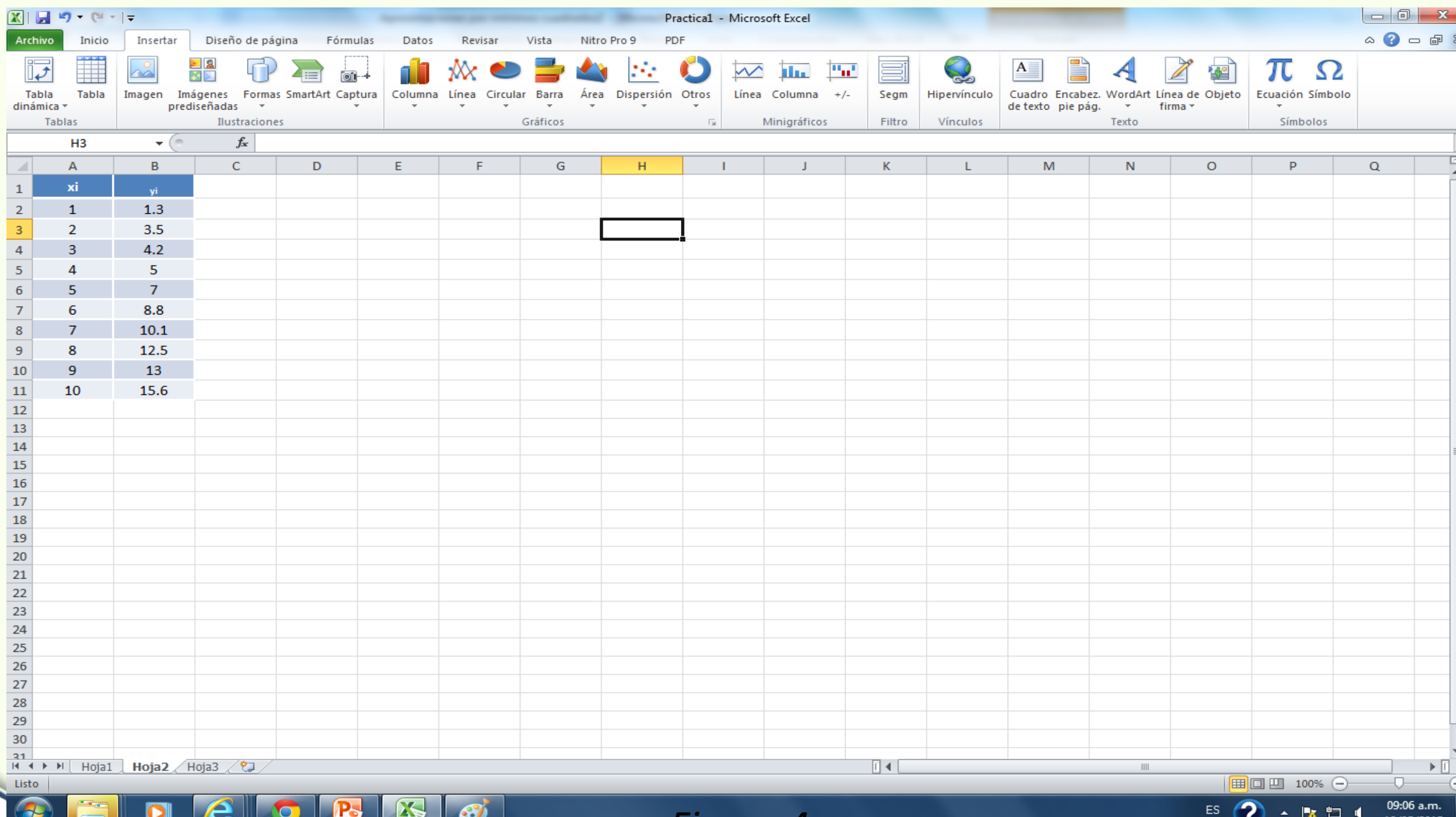


Figura 4

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Su pantalla se debe ver de la siguiente manera:

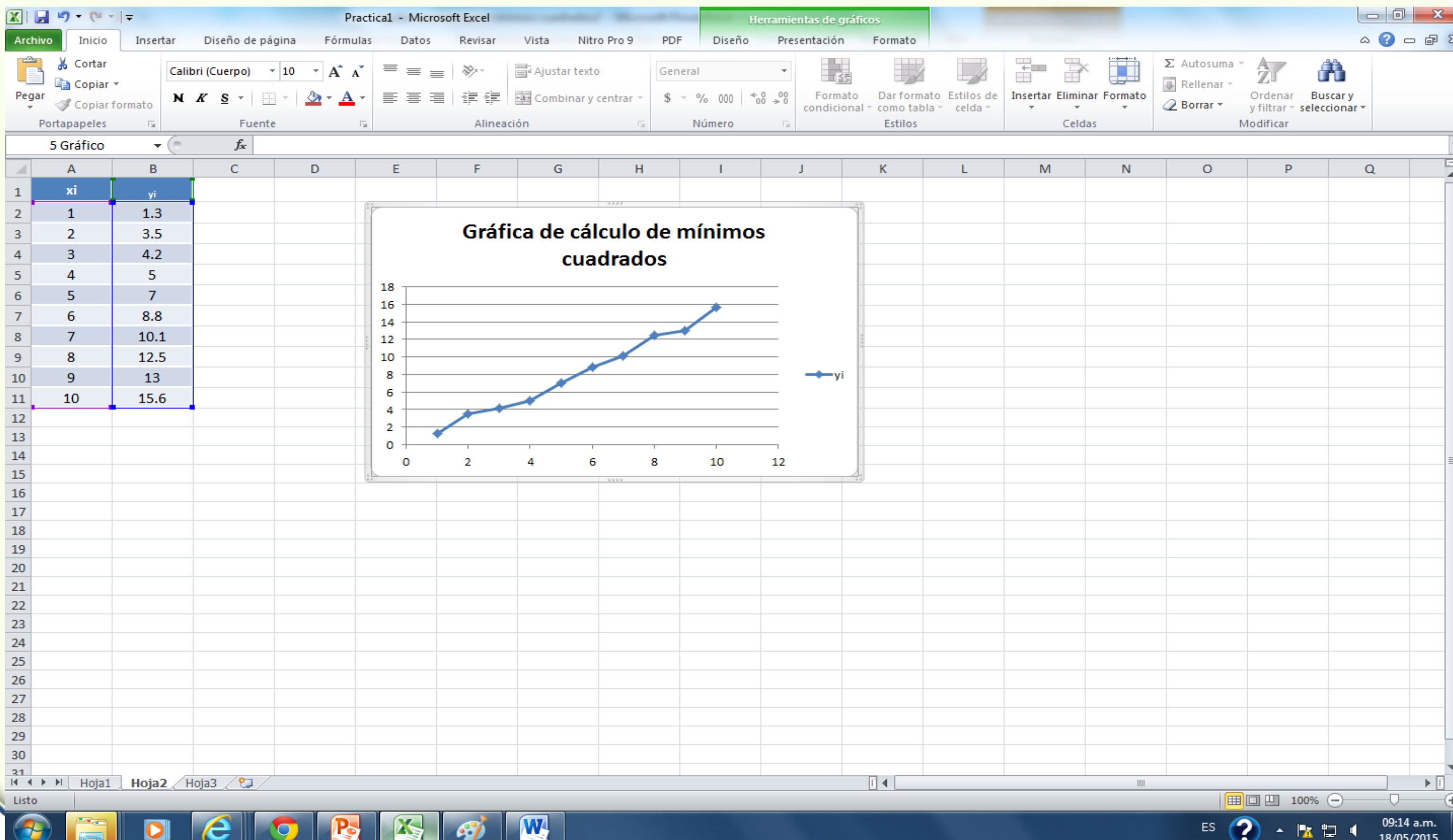
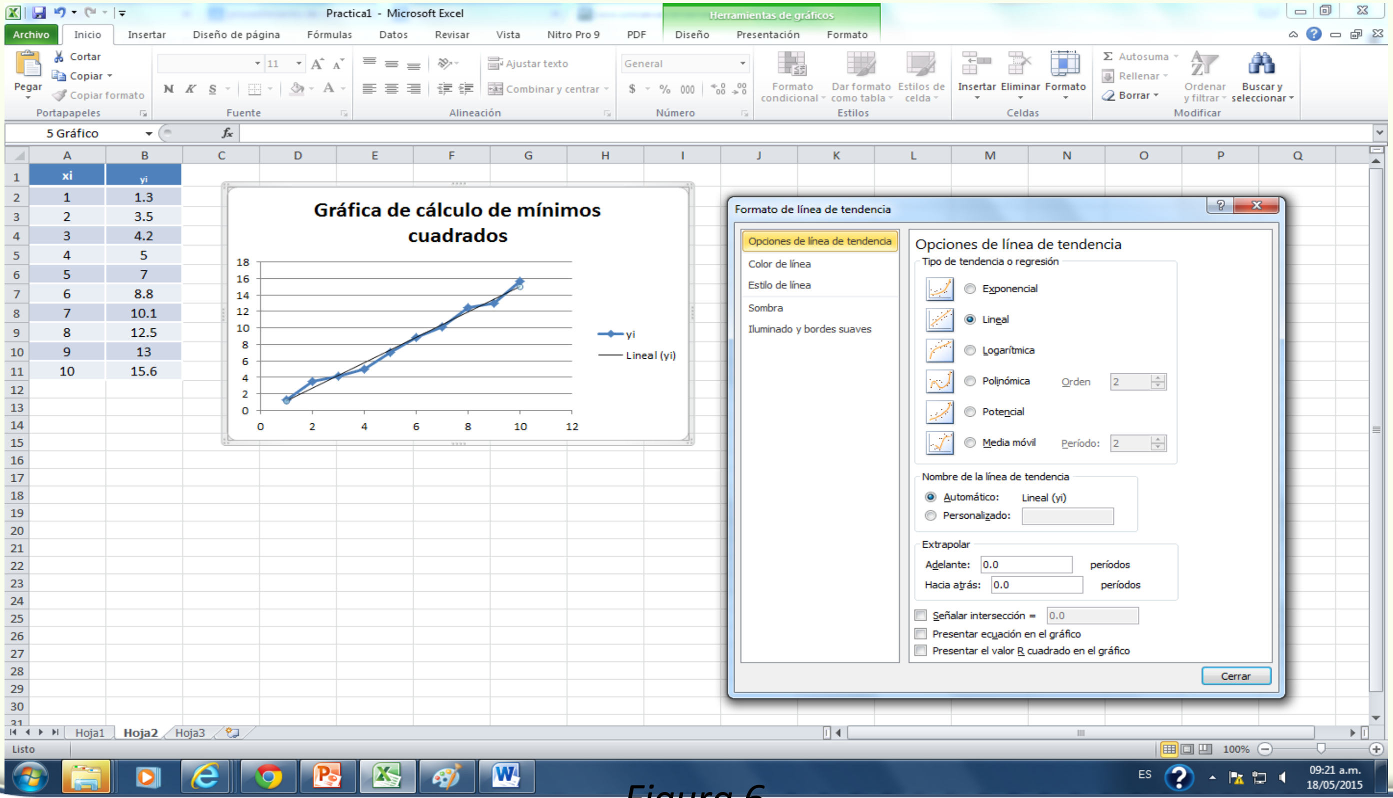


Figura 5

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Nos colocamos en la gráfica y oprimimos el botón secundario, seleccionamos el submenú **Formato de línea de tendencia** y nos aparece el siguiente submenú:



xi	yi
1	1.3
2	3.5
3	4.2
4	5
5	7
6	8.8
7	10.1
8	12.5
9	13
10	15.6

Figura 6

MODELOS LINEALES CON EXCEL

En opciones de línea de tendencia, seleccionamos lineal y también **presentar ecuación en el gráfico**:

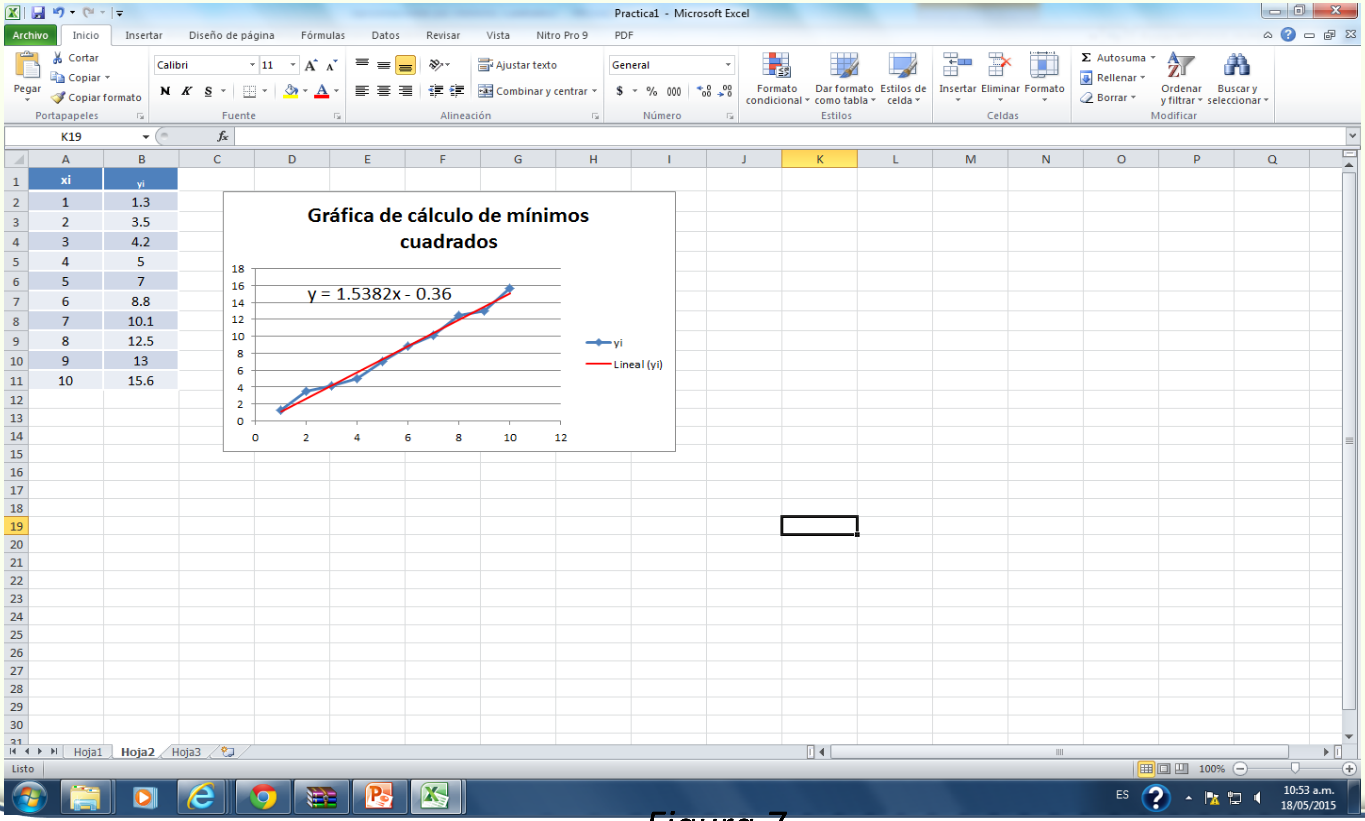


Figura 7

OTRO MÉTODO DE SOLUCIÓN

Tomando los datos anteriores, obtenga la línea de mínimos cuadrados que aproxima estos datos, extendiendo la tabla y sumando las columnas como se indica en las columnas tercera y cuarta de la siguiente tabla:

x_i	yi	x_i^2	$x_i y_i$	$P(x_i)$
1	1.3			
2	3.5			
3	4.2			
4	5			
5	7			
6	8.8			
7	10.1			
8	12.5			
9	13			
10	15.6			
$\sum = 55$	$\sum = 81.0$	$\sum =$	$\sum =$	

Tabla 2

OTRO MÉTODO DE SOLUCIÓN

Calculando a_0 y a_1 para sustituirlo en la tabla anterior:

$$a_o = \frac{385(81) - 55(572.4)}{10(385) - (55)^2} = -0.360$$

$$a_1 = \frac{10(572.4) - 55(81)}{10(385) - (55)^2} = 1.538$$

$$P(x_i) = a_1 x_i + a_o$$

Fórmulas 6

EJEMPLO

Llenado de la tabla y calculo de $P(x_i)$

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$	$P(x_i)= a_i x_i + a_o$
1	1.3	1	1.3	
2	3.5	4	7.0	
3	4.2	9	12.6	
4	5	16	20.0	
5	7	25	35.0	
6	8.8	36	52.8	
7	10.1	49	70.7	
8	12.5	64	100.0	
9	13	81	117.0	
10	15.6	100	156.0	
$\sum x_i = 55$	$\sum y_i = 81.0$	$\sum x_i^2 = 385$	$\sum x_i y_i = 572.4$	

Tabla 3

EJEMPLO

Llenado de la tabla y calculo de $P(x_i)$

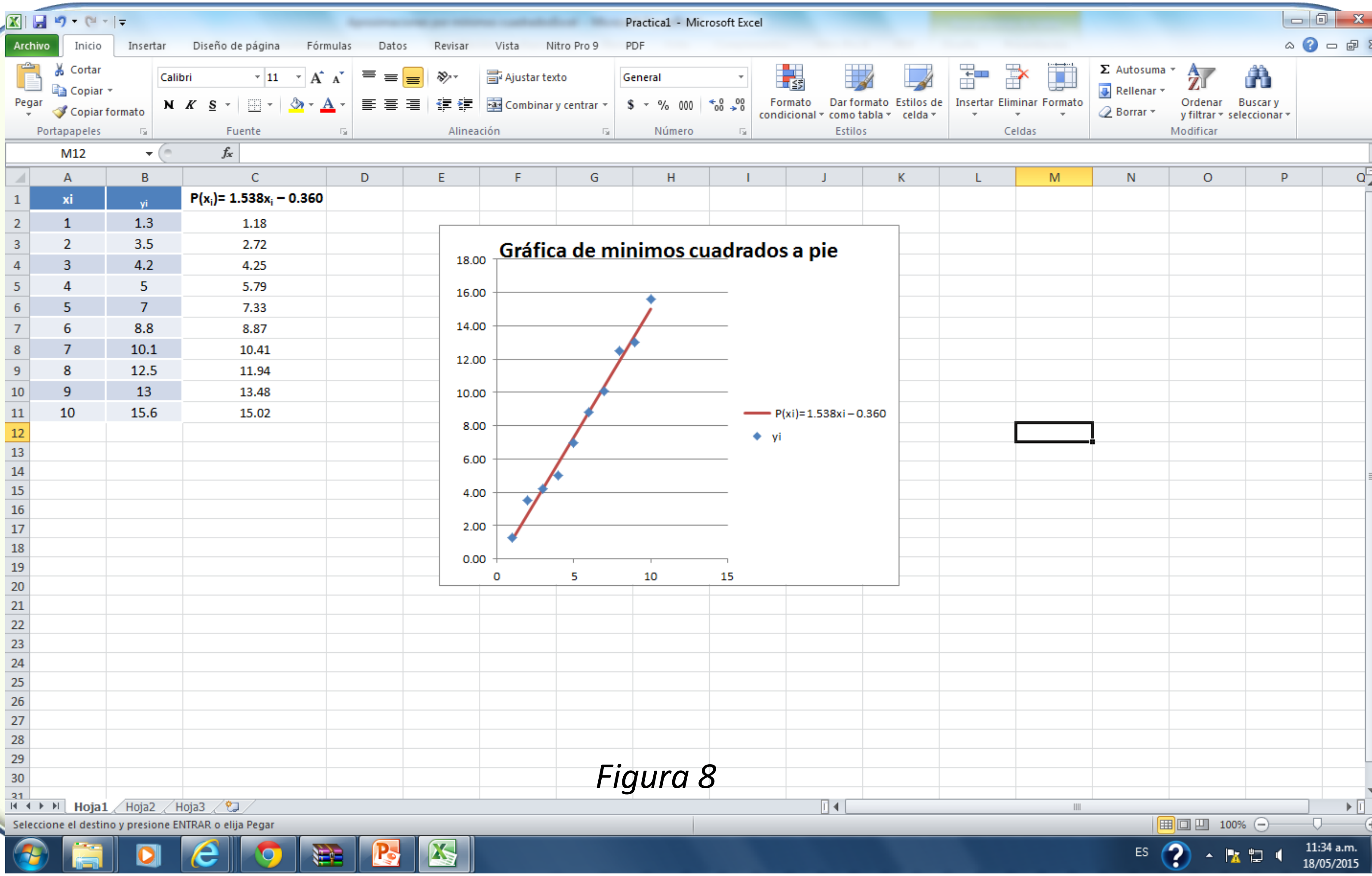
x_i	yi	x_i^2	$x_i y_i$	$P(x_i) = 1.538x_i - 0.360$
1	1.3	1	1.3	1.18
2	3.5	4	7.0	2.72
3	4.2	9	12.6	4.25
4	5	16	20.0	5.79
5	7	25	35.0	7.33
6	8.8	36	52.8	8.87
7	10.1	49	70.7	10.41
8	12.5	64	100.0	11.94
9	13	81	117.0	13.48
10	15.6	100	156.0	15.02
$\sum x_i = 55$	$\sum y_i = 81.0$	$\sum x_i^2 = 385$	$\sum x_i y_i = 572.4$	$E = \sum_{i=1}^{10} (yi - P(x_i))^2 \approx 2.34$

Tabla 4

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Nuevamente habrá una nueva hoja de cálculo de EXCEL. Una vez abierta la hoja de cálculo, introducimos en la primera columna los valores de la variable independiente (x_i) y en la segunda columna los de la variable dependiente (y_i) y una tercera columna con $P(x_i)$, esto es, los valores de x en la primera y los valores de y en la segunda columna y los valores obtenidos $P(x_i)= a_i x_i+a_o$, a continuación seleccionamos todas las celdas.

MODELOS LINEALES CON EXCEL



xi	yi	$P(x_i)= 1.538x_i - 0.360$
1	1.3	1.18
2	3.5	2.72
3	4.2	4.25
4	5	5.79
5	7	7.33
6	8.8	8.87
7	10.1	10.41
8	12.5	11.94
9	13	13.48
10	15.6	15.02

Figura 8

RESUMEN DE LOS MODELOS LINEALES

Como casos particulares de ajustes de este tipo se tiene:

1. Ajuste lineal (recta de mínimos cuadrados) si se utiliza:

$\varphi(x)= a+ bx.$ *Fórmula 7*

2. Ajuste polinomial si se utiliza el modelo:

$\varphi(x)= a_0+ a_1x+.... + a_kx_k$ (llamado cuadrático o cúbico para k=2 ó 3). *Fórmula 8*

3. Ajuste con spline lineal (1 nodo interior x*) si se utiliza el modelo:

$\varphi(x)= a_0+ a_1x+ a_3(x-x^*)$ *Fórmula 9*

RESUMEN DE LOS MODELOS LINEALES

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

1. Ajuste exponencial cuando se usa el modelo*:*

   $\varphi(x) = ae^{bx}$. *Fórmula 10*

2. Ajuste potencial si se toma

   $\varphi(x) = ax^{b}$. *Fórmula 11*

3. Ajuste racional si se considera un modelo del tipo:

   $\varphi(x) = \frac{1}{a+bx}$ *Fórmula 12*

Aproximaciones por mínimos cuadrados (caso polinomial)

Regresión Lineal

El ejemplo más simple de aproximación por mínimos cuadrados es ajustar una línea recta a un conjunto de observaciones definidas por puntos:

$$(x_1,y_1), (x_2,y_2),.........,(x_n,y_n)$$

Fórmula 13

La expresión matemática para la línea recta es:

Fórmula 14

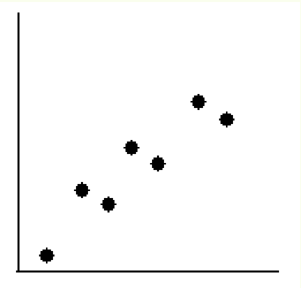
$$y = a_o + a_1 x + e$$

- Donde a_0 y a_1 son coeficientes que representan la intersección con el eje "y" y la pendiente, respectivamente.
- e= es el error, o diferencia, entre el modelo y las observaciones, el cual se representa al reordenar la ecuación, quedando como sigue:

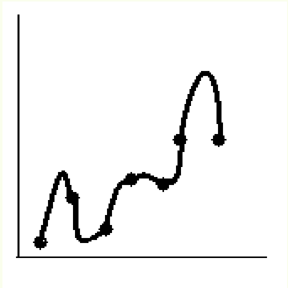
Fórmula 15

$$e = y - a_o - a_1 x$$

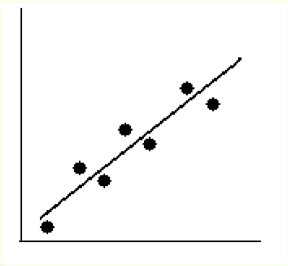
PROBLEMA



Datos con un error significativo



Ajuste polinomial oscilando mas allá del rango de los datos



Resultados más satisfactorios mediante el ajuste por mínimos cuadrados

Gráfica 1

PROCEDIMIENTO

El error o residuo "e" es la discrepancia entre el valor verdadero de "y" y el valor aproximado "$a_0 + a_1x$", el cual se predice en la ecuación lineal.

Si se minimiza la suma de los errores residuales de todos los datos disponibles se tiene una mejor línea de ajuste, es decir,

$$\sum e_i = \sum (y_i - a_0 - a_1x_i)$$ *Fórmula 16*

Las sumas van de i=1 hasta n=número de puntos.

Una mejor aproximación es minimizar la suma de los valores absolutos:

Fórmula 17

$$\sum |e_i| = \sum | y_i - a_0 - a_1x_i |$$

Para i=1 a n, los dos criterios anteriores, sin embargo, no son adecuados pues no dan un "único" mejor ajuste.

Linealización de Relaciones No Lineales

En la regresión lineal no siempre se da el caso de que la relación entre las variables dependientes e independientes es lineal. Por ejemplo, si los datos son curvilíneos, no se debe utilizar el método de regresión lineal por mínimos cuadrados .

Linealización de Relaciones no Lineales

Existen ocasiones en que los datos no son compatibles con la regresión lineal, por lo tanto, se debe recurrir a una transformación. Estas transformaciones matemáticas son capaces de manipular las ecuaciones para que resulten de una manera lineal, y después de esto aplicar el método de regresión lineal simple para ajustar las ecuaciones a los datos .

Ejemplo: Ecuación de Potencias

$$y = ax^{b}$$

Fórmula 18

Linealización de Relaciones No Lineales

En la siguiente Tabla se observan los datos por graficar de la ecuación de potencias sin logaritmo y con logaritmo.

x	y	logx	logy
1	0,5	0	-0,301
2	1,7	0,301	0,226
3	3,4	0,477	0,534
4	5,7	0,602	0,753
5	8,4	0,699	0,922

Tabla 5

Linealización de Relaciones no Lineales

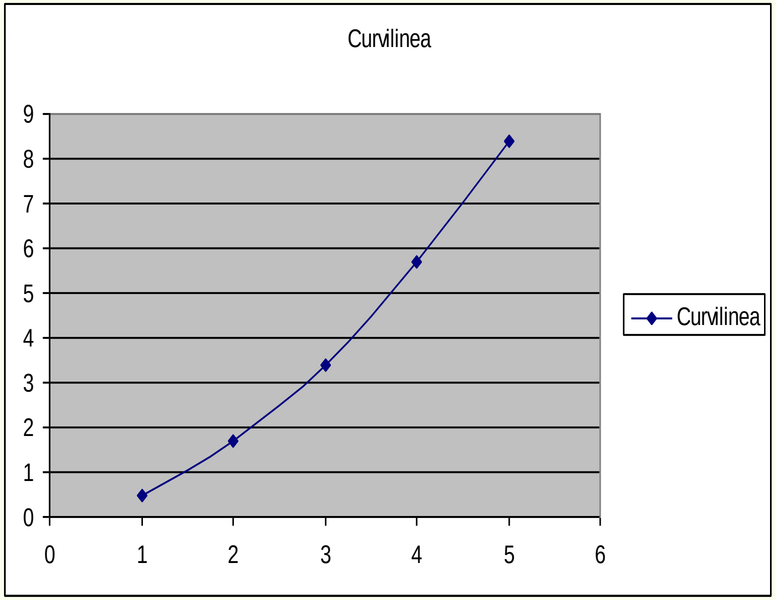
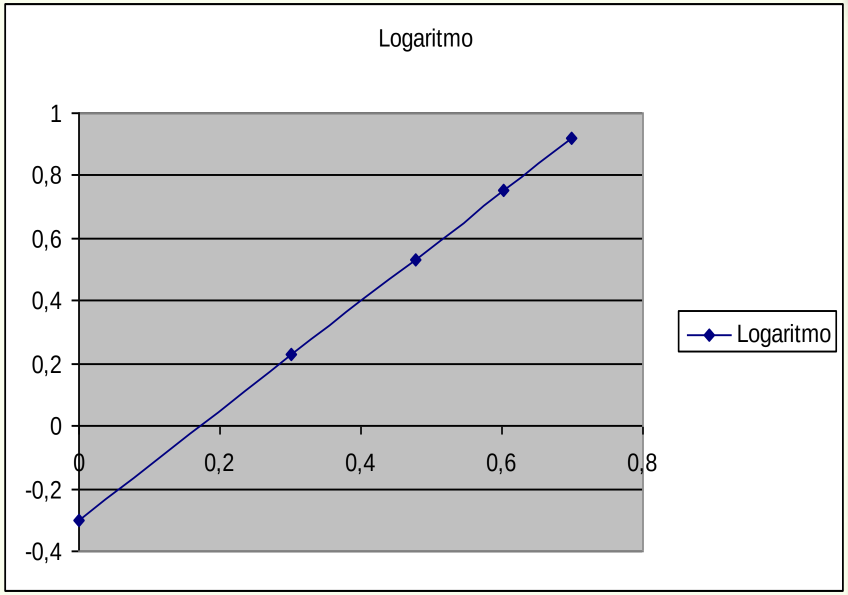


Gráfico de Y vrs X



Gráfica de log(y) vrs log(x)

Gráficas 2

Regresión Polinomial

Consiste en otra alternativa, para ajustar polinomios a los datos. Se requiere ajustar a un polinomio de segundo grado ó cuadrático:

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e \qquad \textit{Fórmula 19}$$

La suma de los cuadrados de los residuos es:

$$Sr = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i{}^2)^2 \qquad \textit{Fórmula 20}$$

Se deriva Sr con respecto a a_0:

$$-2\sum (y_i - a_0 - a_1 x_1 - a_2 x_i{}^2) \qquad \textit{Fórmula 21}$$

Regresión Polinomial

Luego con respecto a a_1:

$$-2\sum x_i(y_i - a_0 - a_1x_1 - a_2x_i{}^2)$$

Fórmula 22

Se iguala 0, y se reordena:

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

Fórmulas 23

n hasta *i = 1*

Se tiene entonces un sistemas de ecuaciones, con 3 incógnitas (a_0,a_1,a_2), entonces se puede extender un polinomio de n-ésimo grado como sigue:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + ...a_mx^m + e$$

Fórmula 24

Ejemplo

Ajuste los datos de la siguiente tabla de datos con el polinomio discreto de mínimos cuadrados de segundo grado.

i	*xi*	*yi*
1	0	1
2	0.25	1.284
3	0.5	1.6487
4	0.75	2.117
5	1	2.7183

Tabla 6

Ejemplo

Calcule ahora el sistema de ecuaciones para determinar los valores de a_o, a_1 y a_2 respectivamente, por el método de Gauss-Jordan:

En este caso, n = 2, m=5, y las tres ecuaciones normales:

$$5a_o + 2.5a_1 + 1.875a_2 = 8.7680$$

$$2.5a_o + 1.875a_1 + 1.5625a_2 = 5.4514$$

$$1.875a_o + 1.5625a_1 + 1.3828a_2 = 4.4015$$

$$P(xi) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots\ldots a_m x^m$$ *Fórmula 25*

Ejemplo

Resolviendo el sistema de ecuaciones se obtienen los siguientes resultados

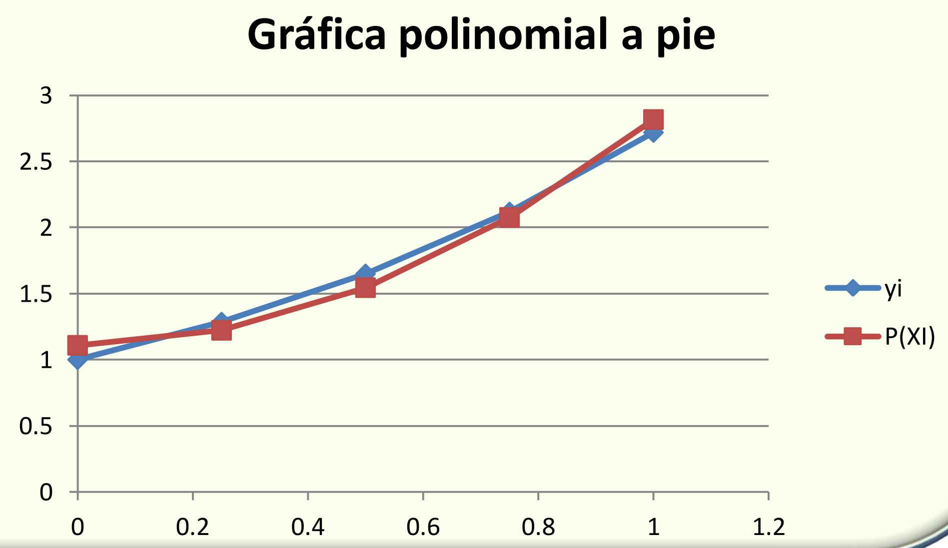
- $a_0 = 1.10849$
- $a_1 = 0.0364$
- $a_2 = 1.67176$

$$E = \sum_{i=1}^{5}(yi - P(xi))^2 = 0.0378$$

Ejemplo

i	xi	yi	P(XI)	(yi-P(xi))2
1	0	1	1.10849	0.0118
2	0.25	1.284	1.22208	0.0038
3	0.5	1.6487	1.54463	0.0108
4	0.75	2.117	2.07616	0.0017
5	1	2.7183	2.81665	0.0097
				0.0378

Tabla 7

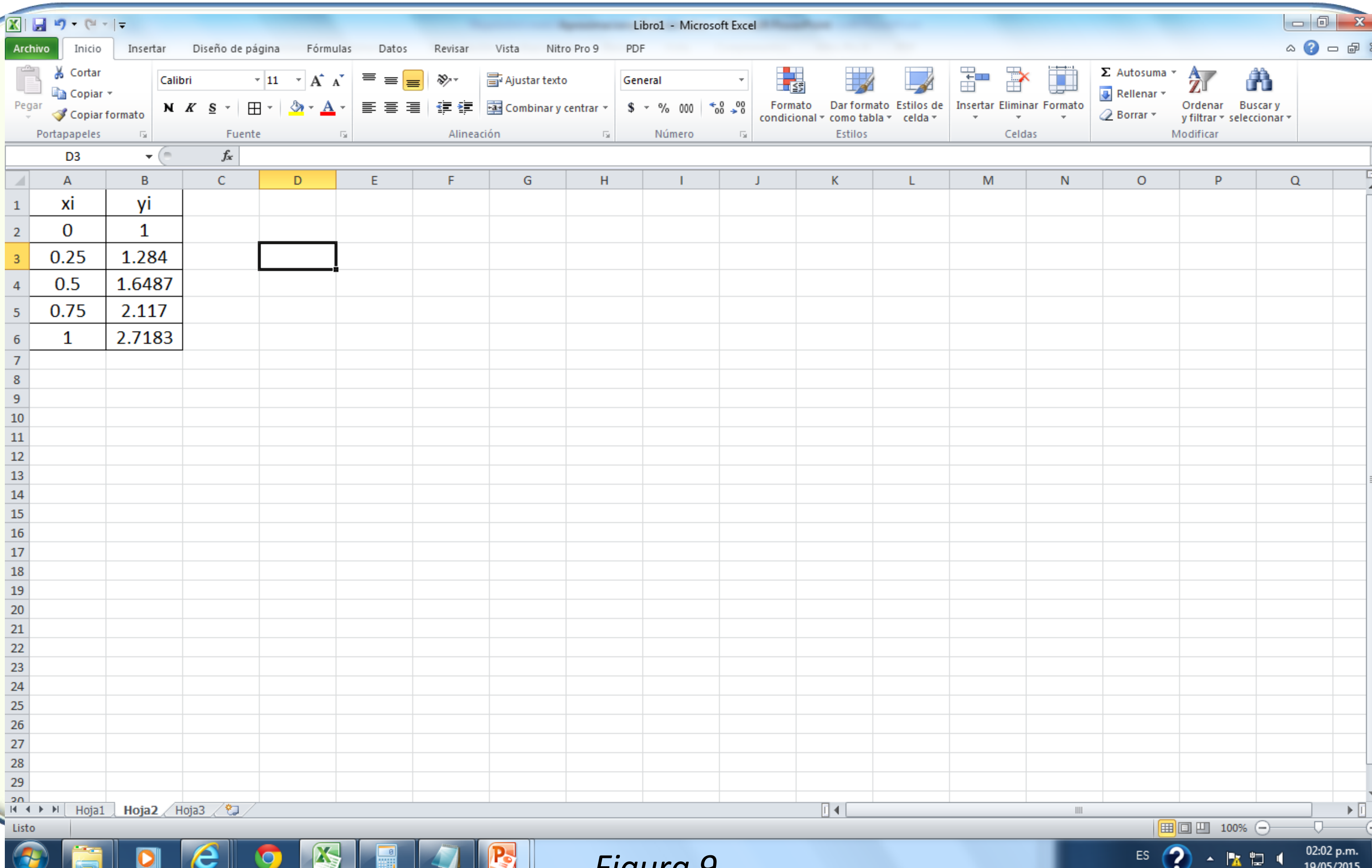


Gráfica 3

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Nuevamente vamos a utilizar un procedimiento en Excel que nos facilita y agiliza todos los cálculos anteriores. Una vez abierta la hoja de cálculo introducimos en la primera columna los valores de la variable independiente (x_i) y en la segunda columna los de la variable dependiente (y_i), esto es, los valores de x en la primera y los valores de y en la segunda columna, a continuación seleccionamos todas las celdas, este será el aspecto de nuestra hoja:

MODELOS POLINOMIALES CON EXCEL



xi	yi
0	1
0.25	1.284
0.5	1.6487
0.75	2.117
1	2.7183

Figura 9

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Seleccionamos en la pestaña gráficos, el XY (Dispersión) y en Subtipo el que considere más adecuado y de clip:

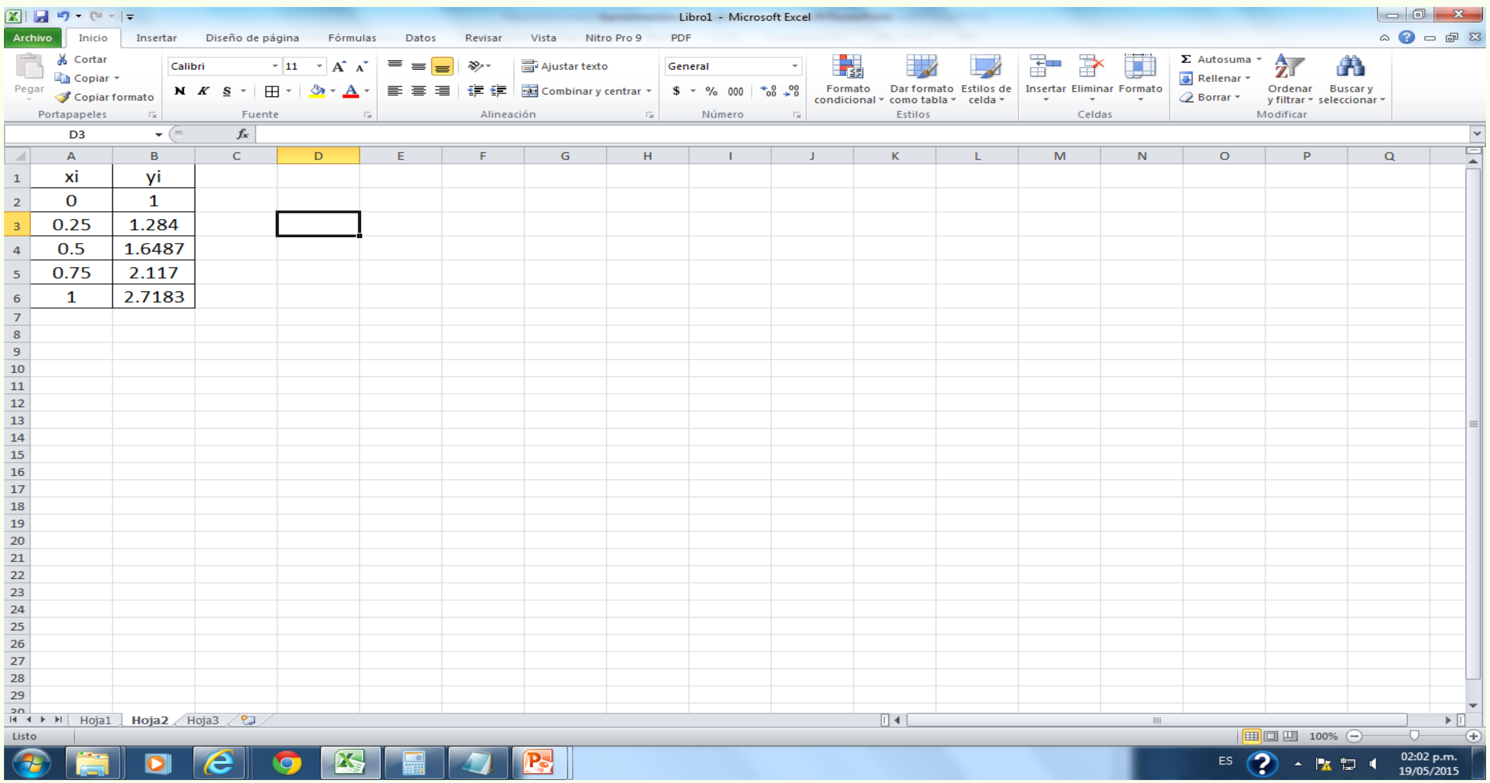


Figura 10

MODELOS POLINOMIALES CON EXCEL

Su pantalla se debe ver de la siguiente manera:

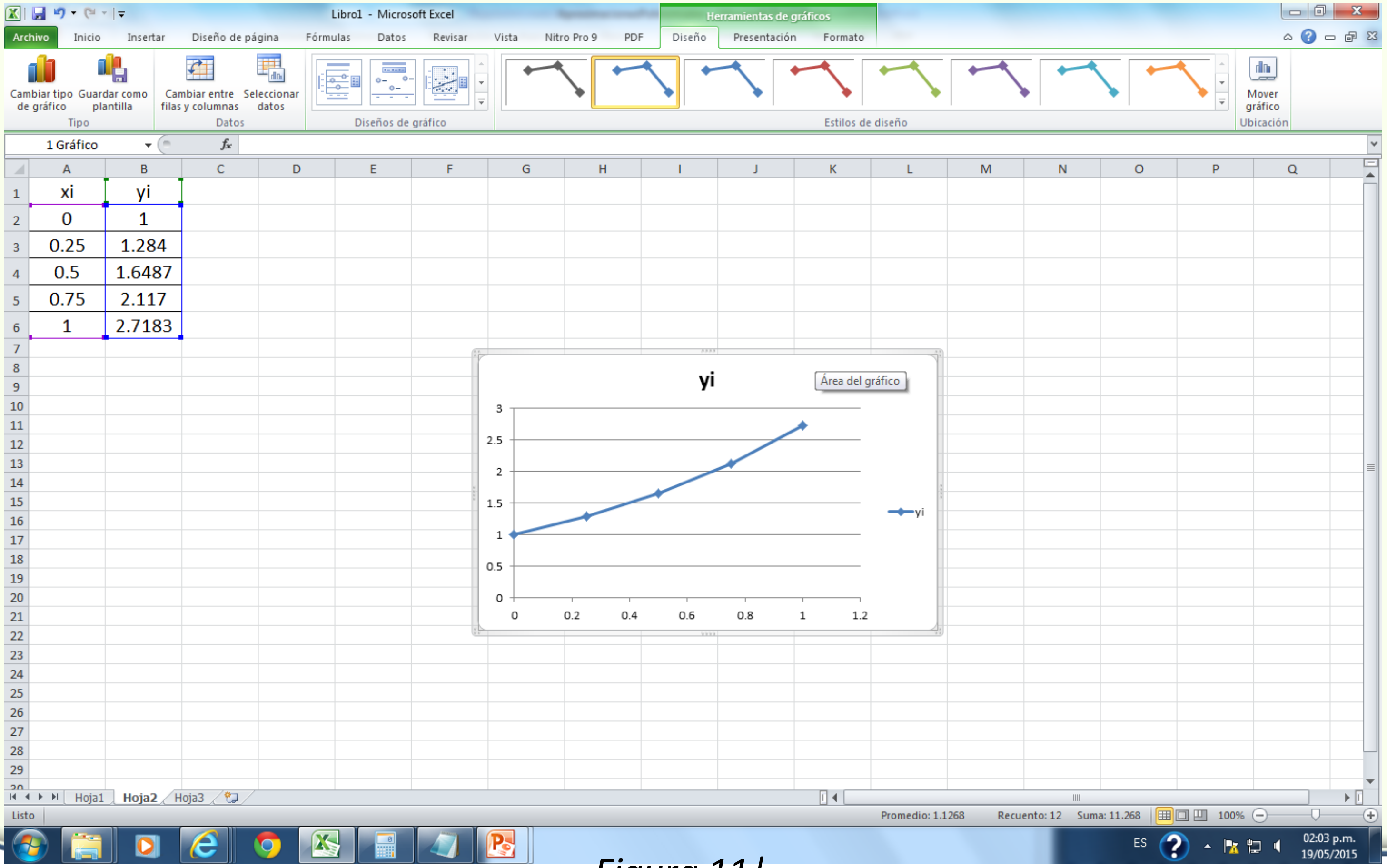


Figura 11

MODELOS LINEALES CON EXCEL

Nos colocamos en la gráfica y oprimimos el botón secundario, seleccionamos el submenú **Formato de línea de tendencia** y nos aparece la siguiente pantalla:

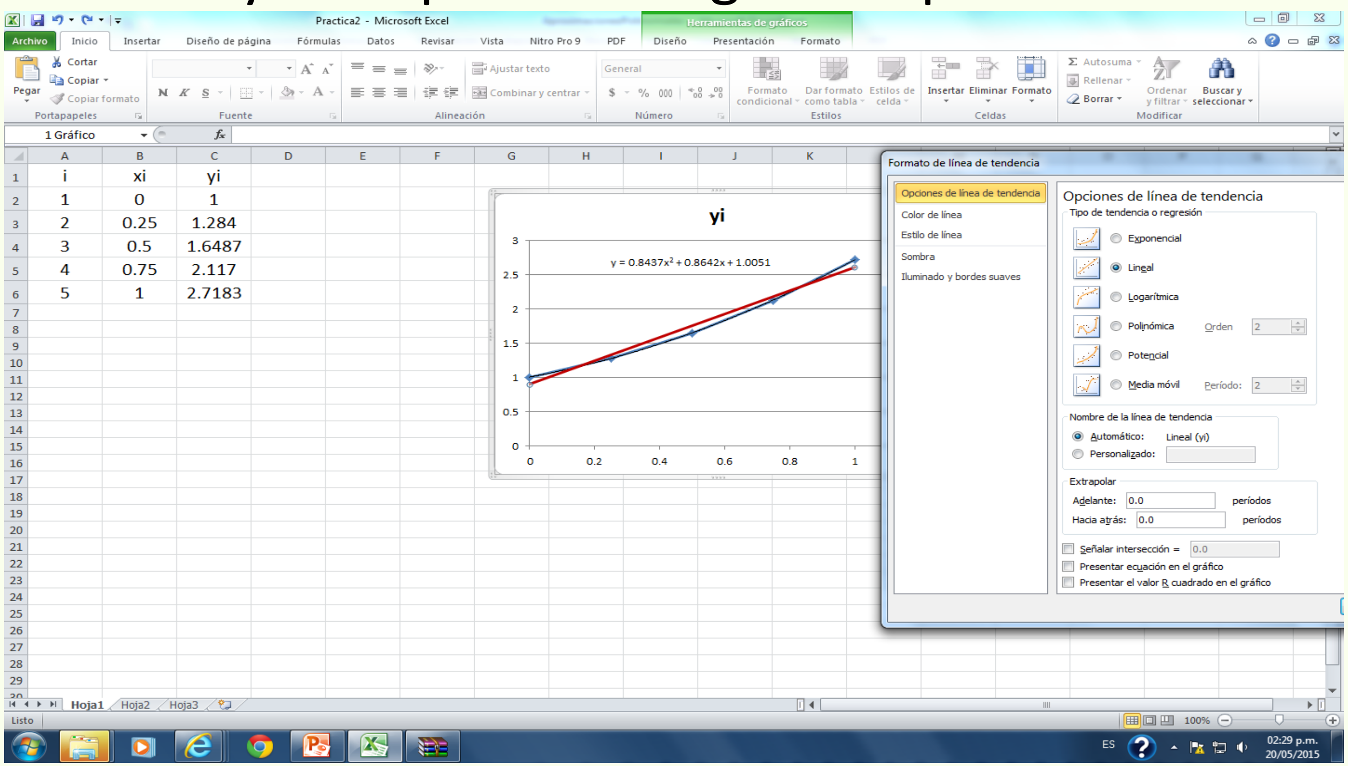


Figura 12

MODELOS LINEALES CON EXCEL

En opciones de línea de tendencia, seleccionamos lineal y también **presentar ecuación en el gráfico**:

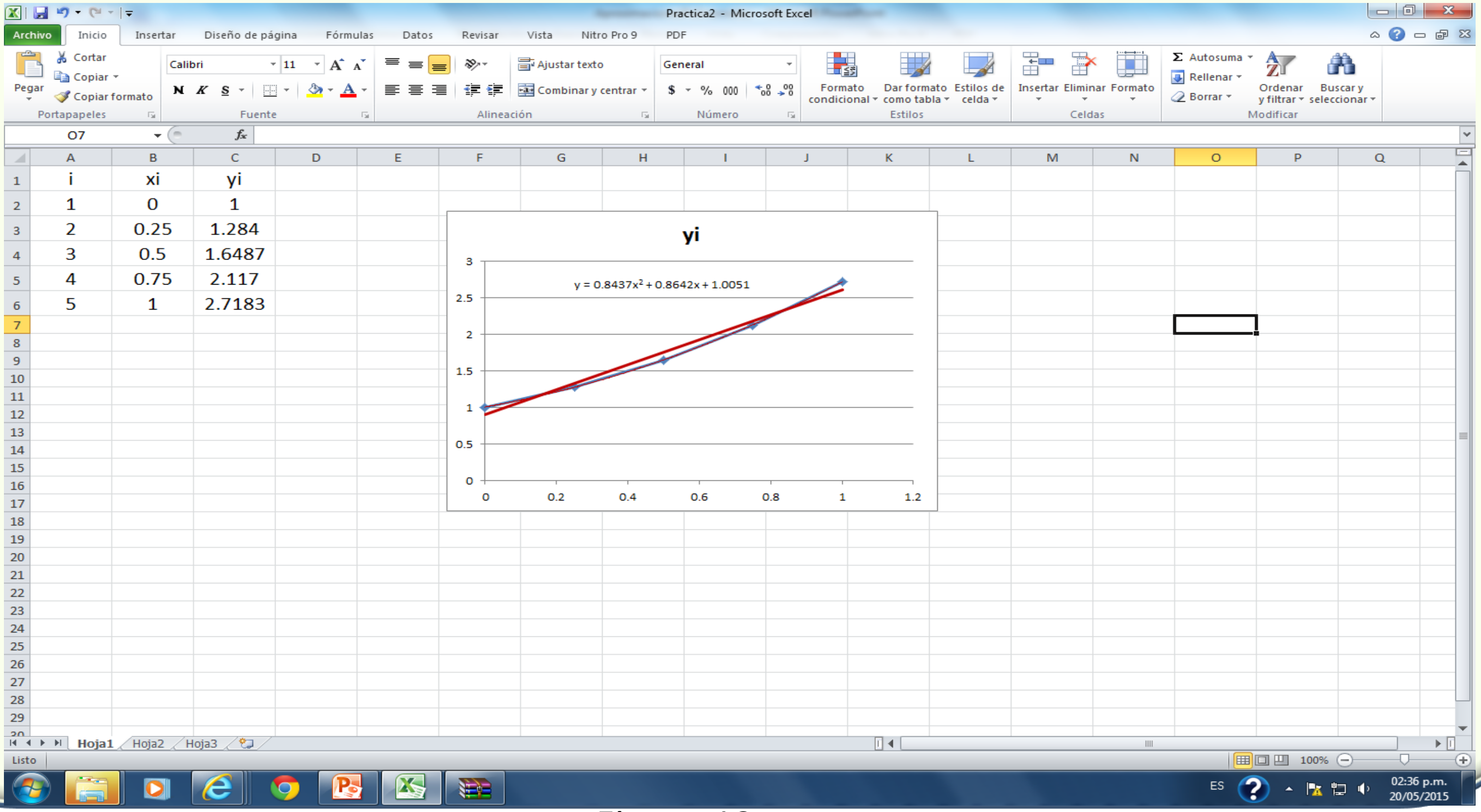


Figura 13

CONCLUSIONES

Al final del presente material se pudo observar entre los alumnos una mejoría en su desempeño en el aprendizaje en la resolución de problemas relacionados con mínimos cuadrado, al resolverlos de manera manual y al utilizar el software (Excel).

En la aplicación de la teoría de mínimos cuadrados al ajuste de curvas de acuerdo a los métodos: regresión lineal simple y regresión polinomial, se pudo comprobar como el software estimulaba y ayudaba en la compresión de este tema (mínimos cuadrados).

REFERENCIAS

1. C. Chapra Steven y P. Canale Raymond. (2006). *Métodos numéricos para ingenieros con aplicaciones en computadoras personales*, 5ª. Edición. México, McGraw-Hill.
2. L. Burden Richard, (2002), *Análisis Numérico*, 7ª Edición. México. Thomson.
3. Nakamura Schoichiro. (1996). *Métodos numéricos aplicados con software*. México. Prentice-Hall Hispanoamericana, S.A.

REFERENCIAS (b)

ELEMENTO	REFERENCIA TOMADA
Figura 1 y Gráfica 1	C. Chapra Steven y P. Canale Raymond. (2006). *Métodos numéricos para ingenieros con aplicaciones en computadoras personales*, 5ª. Edición. México, McGraw-Hill.
Figuras: 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12. Tablas: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7. Gráficas: 2, 3.	Realizadas software Microsoft Excel, versión 2010. Nakamura Schoichiro. (1996). *Métodos numéricos aplicados con software*. México. Prentice-Hall Hispanoamericana, S.A.
Fórmulas: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25,	L. Burden Richard, (2002), *Análisis Numérico*, 7ª Edición. México. Thomson.