FÍSICA I

Cuadrados mínimos

La metodología aquí descripta se aplica al ajuste de puntos por funciones lineales, pero puede fácilmente extenderse a cualquier tipo de función.

Se tiene una colección de N pares de puntos $(x_1, y_1),\ldots,(x_N, y_N)$. La intención es encontrar una recta que mejor se ajuste al comportamiento de una variable en términos de la otra. Por tradición, la variable independiente (dependiente) será $x\,(y)$. De esta forma, se pretende aproximar el comportamiento de y por la función $ax+b$ pidiendo que la cantidad

$$\sum_i (y_i - ax_i - b)^2 \qquad (1)$$

sea mínima. Nótese que la condición exigida es que la sumatoria de los cuadrados de las diferencias entre la recta y los valores de la variable dependiente sea mínima. El cuadrado en la expresión anterior permite establecer que cuando la sumatoria es nula cada uno de los términos lo es, y entonces el ajuste es perfecto. En cualquier otro caso la sumatoria es mayor que cero. A esta altura de las circunstancias el lector ya se habrá percatado del por qué de la terminología "cuadrados mínimos"…

Las dos cantidades a determinar son la pendiente a y la ordenada al origen b. La condición de minimización exige resolver el sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas siguiente

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial a}\displaystyle\sum_i (y_i - ax_i - b)^2 = 0 \\ \dfrac{\partial}{\partial b}\displaystyle\sum_i (y_i - ax_i - b)^2 = 0 \end{cases} \qquad (2a)$$

Utilizando (1) el sistema anterior puede escribirse como

$$\begin{cases} \sum_i x_i y_i = a \sum_i x_i^2 + b \sum_i x_i \\ \sum_i y_i = a \sum_i x_i + Nb \end{cases} \qquad (2b)$$

Las expresiones para a y b que resultan de resolver el sistema de ecuaciones $(2b)$ son

$$a = \frac{N \sum_i x_i y_i - \sum_i x_i \sum_i y_i}{N \sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i \right)^2} \qquad (3a)$$

$$b = \frac{N \sum_i x_i^2 \sum_i y_i - \sum_i x_i y_i \sum_i x_i}{N \sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i \right)^2} \qquad (3b)$$

Ambos coeficientes pueden calcularse aplicando las fórmulas anteriores por medio de las sumatorias auxiliares $\sum_i x_i$, $\sum_i y_i$, $\sum_i x_i^2$ y $\sum_i x_i y_i$.

Ejemplo

Dada la siguiente tabla de datos, se desea conocer cuál es la recta que mejor los aproxima por cuadrados mínimos.

x	y
1	1
2	4
3	9
4	16
5	25

Una breve inspección indica que la relación existente entre x e y no es lineal, sino cuadrática, con $y = x^2$. Este es un caso en el cual se conoce de antemano la relación entre ambas variables, pero en la mayoría de los casos tal relación es desconocida y entonces habrá que probar con distintas funciones elementales hasta encontrar la que mejor ajuste. De todas ellas, sin dudas es la recta la que presenta la ecuación más sencilla. Pendiente y ordenada al origen para la recta que mejor ajusta se calculan haciendo uso de las sumatorias auxiliares abajo mostradas.

$$\sum_i x_i = 1 + 2 + 3 + 4 + 5 = 15$$

$$\sum_i y_i = 1 + 4 + 9 + 16 + 25 = 55$$

$$\sum_i x_i^2 = 1 + 4 + 9 + 16 + 25 = 55$$

$$\sum_i x_i y_i = 1 + 8 + 27 + 64 + 125 = 225$$

Utilizando $(3a)$ y $(3b)$ se tiene que $a = \dfrac{5 \times 225 - 15 \times 55}{5 \times 55 - (15)^2} = \dfrac{300}{50} = 6$ y $b = \dfrac{55 \times 55 - 225 \times 15}{5 \times 55 - (15)^2} = -\dfrac{350}{50} = -7$. Así, la recta que mejor aproxima a nuestro conjunto de datos es $y = 6x - 7$. Los datos graficados y la recta que mejor ajusta se muestran a continuación.