



TUTORIAL DE ANÁLISIS NUMÉRICO

Aproximación : Ajuste de funciones

Método de los mínimos cuadrados

Jesús García Quesada

Departamento de Informática y Sistemas

Universidad de Las Palmas de Gran Canaria

35017 Campus de Tafira, España

Email : jgarcia@dis.ulpgc.es

2 de Octubre de 2000, v0.3

[Página Web](#)[Página de Inicio](#)[Contenido](#)[Página 1 de 16](#)[Volver](#)[Pantalla completa](#)[Cerrar](#)[Salir](#)



Índice General

1 AJUSTE DE FUNCIONES.
APROXIMACIÓN MÍNIMO CUADRÁTICA

3

2 PROBLEMAS

10

Soluciones a los Problemas

13

[Página Web](#)[Página de Inicio](#)[Contenido](#)[Página 2 de 16](#)[Volver](#)[Pantalla completa](#)[Cerrar](#)[Salir](#)



1. AJUSTE DE FUNCIONES.

APROXIMACIÓN MÍNIMO CUADRÁTICA

Sean (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$ una nube de puntos con pesos $w_i \geq 0$ y sea $\{g_j\}_{j=1}^m$ una familia de funciones básicas.

Si llamamos

$$\phi(x) = c_1 g_1(x) + c_2 g_2(x) + \dots + c_m g_m(x) = \sum_{j=1}^m c_j g_j(x)$$

donde las c_j están por determinar, se trata de hacer mínimo el error cuadrático :

$$e = \sum_{i=1}^n w_i (\phi(x_i) - y_i)^2 \quad (1)$$

siendo $y_i = f(x_i)$, f desconocida.

Por tanto, una condición necesaria de existencia de mínimo para e es :

$$\frac{\partial e}{\partial c_k} = 0, \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, m \quad (2)$$

que se denomina sistema de ecuaciones normales y es en definitiva un sistema de ecuaciones lineales con m incógnitas c_j .

Desarrollando (1) tenemos :

$$e = w_1 (\phi(x_1) - y_1)^2 + w_2 (\phi(x_2) - y_2)^2 + \dots + w_n (\phi(x_n) - y_n)^2 =$$

$$w_1 (c_1 g_1(x_1) + \dots + c_m g_m(x_1) - y_1)^2 + \dots + w_n (c_1 g_1(x_n) + \dots + c_m g_m(x_n) - y_n)^2$$



Por tanto :

$$\begin{aligned}\frac{\partial e}{\partial c_k} &= 2w_1(\phi(x_1) - y_1)g_1(x_1) + 2w_2(\phi(x_2) - y_2)g_k(x_2) + \cdots + 2w_n(\phi(x_n) - y_n)g_k(x_n) = \\ &= 2 \sum_{i=1}^n w_i(\phi(x_i) - y_i)g_k(x_i) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n\end{aligned}\tag{3}$$

de la cual se puede eliminar el 2 ya que está igualado a cero. O sea :

$$w_1(c_1g_1(x_1) + \cdots + c_mg_m(x_1) - y_1)g_k(x_1) + \cdots + w_n(c_1g_1(x_n) + \cdots + c_mg_m(x_n) - y_n)g_k(x_n) = 0$$

Reordenando respecto a las c_k y pasando al segundo miembro los términos con signo negativo tenemos :

$$\begin{aligned}&= c_1(w_1g_1(x_1)g_k(x_1) + \cdots + w_ng_1(x_n)g_k(x_n)) + \cdots + c_m(w_1g_m(x_1)g_k(x_1) + \cdots + w_ng_m(x_n)g_k(x_n)) \\ &= w_1y_1g_k(x_1) + \cdots + w_ny_ng_k(x_n)\end{aligned}$$

donde ya se han pasado al segundo miembro los sumandos con un signo negativo en la expresión anterior. Por tanto, queda :

$$\sum_{j=1}^m c_j \left(\sum_{i=1}^n w_i g_j(x_i) g_k(x_i) \right) = \sum_{i=1}^n w_i y_i g_k(x_i)$$



para $k = 1, 2, \dots, m$. O también en forma matricial :

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n w_i g_1(x_i) g_1(x_i) & \sum_{i=1}^n w_i g_2(x_i) g_1(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^n w_i g_m(x_i) g_1(x_i) \\ \sum_{i=1}^n w_i g_1(x_i) g_2(x_i) & \sum_{i=1}^n w_i g_2(x_i) g_2(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^n w_i g_m(x_i) g_2(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n w_i g_1(x_i) g_m(x_i) & \sum_{i=1}^n w_i g_2(x_i) g_m(x_i) & \cdots & \sum_{i=1}^n w_i g_m(x_i) g_m(x_i) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n w_i y_i g_1(x_i) \\ \sum_{i=1}^n w_i y_i g_2(x_i) \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n w_i y_i g_m(x_i) \end{bmatrix}$$

que se denomina **sistema de ecuaciones normales** para la aproximación por mínimos cuadrados. De aquí se obtienen $c_1, c_2, \dots, c_m$. Nótese que la matriz es simétrica, y definida positiva.

Un caso particular importante es cuando se quiere ajustar los datos a un **polinomio** de un determinado grado, o sea, cuando :

$$\phi(x) = p_n(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 + \cdots + \alpha_m x^{m-1} = \sum_{j=0}^{m-1} \alpha_j x^j$$

En éste caso es $g_j(x) = x^{j-1}$ y por tanto $g_j(x_i) g_k(x_i) = x_i^{j+k-2}$ y el sistema normal queda de la siguiente forma :



$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{m-1} \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^m \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \cdots & \sum x_i^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^{m-1} & \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \cdots & \sum x_i^{2m-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \\ \vdots \\ \sum y_i x_i^{m-1} \end{bmatrix}$$

Ejemplo. Dados los puntos $P_1(1, 6)$, $P_2(2, 1)$, $P_3(4, 2)$, $P_4(5, 3)$, $P_5(10, 4)$, $P_6(16, 5)$ encontrar los polinomios de grados 1,2,3,4,5 y 6 que mejor se ajusten por mínimos cuadrados.

Solución:

Para el caso de grado uno tenemos $p_1(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$ y entonces :

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \end{bmatrix}$$

Y sustituyendo :

$$\begin{bmatrix} 6 & 38 \\ 38 & 402 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21 \\ 151 \end{bmatrix}$$

cuya solución nos da la **recta de regresión** $p_1(x) = 2.793 + 0.1116x$.

Análogamente, para el caso de grado dos tenemos:

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i x_i \\ \sum y_i x_i^2 \end{bmatrix}$$



Y sustituyendo :

$$\begin{bmatrix} 6 & 38 & 402 \\ 38 & 402 & 5294 \\ 402 & 5294 & 76434 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21 \\ 151 \\ 1797 \end{bmatrix}$$

cuya solución nos da $p_2(x) = 4.0593 - 0.4159x + 0.03097x^2$.

$$\begin{bmatrix} 6 & 38 & 402 & 5294 \\ 38 & 402 & 5294 & 76434 \\ 402 & 5294 & 76434 & 1152758 \\ 5294 & 76434 & 1152758 & 17797002 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21 \\ 151 \\ 1797 \\ 24997 \end{bmatrix}$$

cuya solución nos da $p_3(x) = 6.4822 - 2.1813x + 0.3075x^2 - 0.01106x^3$.

El resto de los polinomios resultantes del ajuste son:

$$p_3(x) = 6.482 - 2.181x + 0.3075x^2 - 0.011076x^3$$

$$p_4(x) = 15.43 - 12.75x + 3.494x^2 - 0.33714x^3 + 0.010375x^4$$

$$p_5(x) = 20.72 - 21.74x + 8.28x^2 - 1.3582x^3 + 0.098876x^4 - 0.002579x^5$$

con error cuadrático de 0.182823×10^{-17} .

$$p_6(x) = 13.2005 - 5.8561x - 3.3569x^2 + 2.4861x^3 - 0.5130x^4 + 0.04205x^5 - 0.001174x^5$$

con error cuadrático de 0.229023×10^{-19} .





En algunas ocasiones la función de ajuste no aparece expresada como una combinación lineal de funciones básicas, debiéndose realizar previamente algunas transformaciones con el fin de obtener una ecuación transformada que sea lineal, como es el caso del siguiente ejemplo.

Ejemplo.

La intensidad de la radiación emitida de una fuente radiactiva viene dada por la fórmula $I = I_0 e^{-\alpha t}$. Determinar las constantes α e I_0 usando los datos dados :

t	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
I	3.16	2.38	1.75	1.34	1.00	0.74	0.56

Solución:

Tomando logaritmos neperianos, tenemos :

$$I = I_0 e^{-\alpha t} \Rightarrow \ln I = \ln I_0 - \alpha t \Rightarrow Y = A + Bt$$

con $Y = \ln I$, $A = \ln I_0$ y $B = -\alpha$, con lo que hay que añadir una línea más en la tabla, la correspondiente a $\ln I$ que nos ha aparecido en la linealización :

ln I	1.1506	0.8671	0.5596	0.2927	0	-0.3011	-0.5798
-------------	--------	--------	--------	--------	---	---------	---------

El sistema que resulta es pues :

$$\begin{bmatrix} \sum 1 & \sum t_i \\ \sum t_i & \sum t_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum y_i t_i \end{bmatrix}$$

O sea :



$$\begin{bmatrix} 7 & 3.5 \\ 3.5 & 2.03 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.9891 \\ 0.18583 \end{bmatrix}$$

Y de aquí :

$$A = \frac{3.387468}{1.96} = 1.7283 \implies I_0 = e^A = 5.631073 \simeq 5.63$$

$$B = \frac{-5.66104}{1.96} = -2.8883 \implies \alpha = -B = 2.8883 \simeq 2.89$$

siendo el error cuadrático cometido de 0.366075×10^{-3} .





2. PROBLEMAS

Problema 1. Dada la siguiente nube de puntos :

x_i	-1.3	1	1.2	1.4	-1.1	-2	3
y_i	0.8361	1.0	0.7053	1.0398	0.6865	2.1981	11.7514

encontrar la función del tipo $y = A\sqrt{x^2 - 1} + Be^{\sqrt{x^2 - 1}} + C \sin(\sqrt{x^2 - 1}) \sin(\sqrt{x^2 - 1})$ que mejor se ajuste por mínimos cuadrados. Estimar asimismo el error cuadrático cometido.

Problema 2.

Dada la siguiente nube de puntos :

x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
y_i	0.4204	0.4460	0.4726	0.5027	0.5378	0.5792

encontrar la función del tipo $y = \alpha 2^{\beta x^2 + \gamma \sqrt{x} - 1}$ que mejor se ajuste por mínimos cuadrados. Estimar asimismo el error cuadrático cometido.



Referencias

- [Act90] F.S. Acton. *Numerical Methods That (Usually) Work*. The Mathematical Association of America, Washington, 1990.
- [Atk89] K. E. Atkinson. *An Introduction to Numerical Analysis*. John Wiley, New York, 2nd. edition, 1989.
- [BF80] R.L. Burden and D. Faires. *Análisis Numérico*. Grupo Editorial Iberoamericana, México, 1980.
- [CC89] S.C. Chapra and R.P. Canale. *Numerical Methods for Engineers*. McGraw-Hill International, New York, second edition, 1989.
- [CdB80] S. D. Conte and C. de Boor. *Elementary Numerical Analysis: An Algorithmic Approach*. McGraw-Hill, New York, third edition, 1980.
- [DB74] Germund Dahlquist and Åke Björck. *Numerical Methods*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
- [Fad59] V.N. Faddeeva. *Computational Methods of Linear Algebra*. Dover Publications, Inc, New York, 1959.
- [Frö79] C.-E. Fröberg. *Introduction to Numerical Analysis*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 2nd. edition, 1979.
- [GW89] C.F. Gerald and P.O. Wheatley. *Applied Numerical Analysis*. Addison-Wesley Publishing Co., Reading, Massachusetts, fourth edition, 1989.



- [Hen72] P. Henrici. *Elementos de Análisis Numérico*. Ed. Trillas, México, 1972.
- [Hil74] F. B. Hildebrand. *Introduction to Numerical Analysis*. McGraw-Hill, New York, second edition, 1974.
- [KC94] D. Kincaid and W. Cheney. *Análisis Numérico : las matemáticas del cálculo científico*. Addison-Wesley Iberoamericana, 1994.
- [Mar87] M. J. Maron. *Numerical Analysis: A Practical Approach*. Macmillan Publishing Co., New York, second edition, 1987.
- [ML91] M. J. Maron and R. J. Lopez. *Numerical Analysis: A Practical Approach*. Wadsworth, Belmont, California, third edition, 1991.
- [RR78] Anthony Ralston and Philip Rabinowitz. *A First Course in Numerical Analysis*. McGraw-Hill, New York, 2nd. edition, 1978.
- [Sch89] H.R. Schwarz. *Numerical Analysis*. John Wiley & Sons, Chichester, 1989.
- [Wer84] W. Werner. *Mathematics of Computation*, 43:205–217, 1984.
- [YG73a] David M. Young and R.T. Gregory. *A Survey of Numerical Mathematics*, volume I. Dover Publications, New York, 1973.
- [YG73b] David M. Young and R.T. Gregory. *A Survey of Numerical Mathematics*, volume II. Dover Publications, New York, 1973.
-



Soluciones a los Problemas

Problema 1. Construyendo las siguientes líneas:

x_i	-1.3	1	1.2	1.4	-1.1	-2	3
y_i	0.8361	1.0	0.7053	1.0398	0.6865	2.1981	11.7514
$\sqrt{x_i^2 - 1}$	0.830662	0.0	0.663325	0.979796	0.458258	1.732051	2.828427
$e^{\sqrt{x_i^2 - 1}}$	2.294837	1.0	1.941236	2.663913	1.581317	5.652235	16.918827
$\sin \sqrt{x_i^2 - 1}$	0.545202	0.0	0.379136	0.689537	0.195706	0.974222	9.490827×10^{-2}

y la matriz que queda es por tanto:

$$\begin{bmatrix} 13.3 & 64.172273 & 3.425502 \\ 64.172273 & 337.826137 & 11.245750 \\ 3.425502 & 11.245750 & 1.912867 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 39.540944 \\ 219.387459 \\ 4.831323 \end{bmatrix}$$

y resultan:

$A = -2.085593$, $B = 1.040882$, $C = 0.141162$ siendo entonces la función :

$$y = -2.085593 \sqrt{x^2 - 1} + 1.040882 e^{\sqrt{x^2 - 1}} + 0.141162 \sin(\sqrt{x^2 - 1}) \sin(\sqrt{x^2 - 1})$$

y el error cuadrático $\|e\|_2 = 0.332221$.





Problema 2.

$$\text{Tenemos } \log_2 y = \log_2 \alpha + \beta x^2 + \gamma \sqrt{x} - 1 \implies \underbrace{\log_2 y}_Y = \underbrace{(\log_2 \alpha - 1)}_A + \underbrace{\beta}_B x^2 + \underbrace{\gamma}_C \sqrt{x}$$

o sea, $Y = A + Bx^2 + C\sqrt{x}$, con funciones básicas $g_1(x) = 1$, $g_2(x) = x^2$, $g_3(x) = \sqrt{x}$.

Construyendo entonces la líneas necesarias:

x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
y_i	0.4204	0.4460	0.4726	0.5027	0.5378	0.5792
$Y = \log_2 y_i$	-1.25016506	-1.164884	-1.081308	-0.992230	-0.894858	-0.787866
$\sqrt{x_i}$	0.316228	0.447214	0.547723	0.632456	0.707107	0.774597
x_i^2	0.01	0.04	0.09	0.16	0.25	0.36

El sistema que resulta es:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^6 1 & \sum_{i=1}^6 x_i^2 & \sum_{i=1}^6 \sqrt{x_i} \\ \sum_{i=1}^6 x_i^2 & \sum_{i=1}^6 x_i^4 & \sum_{i=1}^6 x_i^2 \sqrt{x_i} \\ \sum_{i=1}^6 \sqrt{x_i} & \sum_{i=1}^6 x_i^2 \sqrt{x_i} & \sum_{i=1}^6 x_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^6 y_i \\ \sum_{i=1}^6 y_i x_i^2 \\ \sum_{i=1}^6 y_i \sqrt{x_i} \end{bmatrix}$$

Y substituyendo :



$$\begin{bmatrix} 6 & 0.91 & 3.425325 \\ 0.91 & 0.2275 & 0.6271071 \\ 3.425325 & 0.627171 & 2.1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.171311 \\ -0.822518 \\ -3.379128 \end{bmatrix} \quad (\text{o también } \begin{bmatrix} -4.277627 \\ -0.570126 \\ -2.342233 \end{bmatrix} \text{ si es } \ln)$$

con lo que queda:

$A = -1.414679 = \log_2 \alpha - 1 \implies \alpha = s^{-0.414679} \simeq 0.750186$ y por otra parte $B = \beta = 0.667617, C = \gamma = 0.498999$ siendo entonces la función :

$$y = 0.7501862^{0.667617x^2 + 0.498999\sqrt{x} - 1}$$

siendo el error cuadrático 0.161628×10^{-7} en éste caso.

