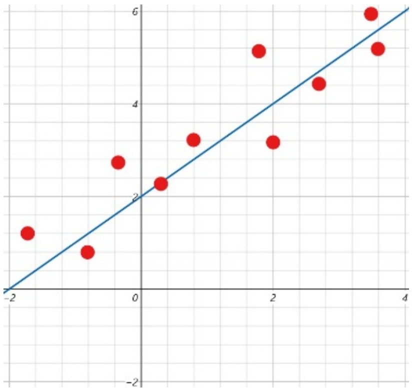
**APUNTES Y EJEMPLOS DE AJUSTE POR MÍNIMOS CUADRADOS:**

Dada una “nube de puntos”, queremos realizar un ajuste empleando una determinada función.

En nuestro caso estamos buscando que esta función se ajuste lo mejor posible a la nube de puntos, es decir queremos que la distancia entre los puntos y el valor que toma la función para un determinado valor de x, sea mínima.




Empecemos por el caso más sencillo: un caso lineal.

Buscamos la recta de ecuación general: R(Sj)=a+b*Sj.

En concreto estamos buscando los valores de a y b que nos darán la expresión de dicha recta.

Si nos fijamos en un punto específico (x=2), el “punto rojo” que pertenece a la nube de puntos no pertenece a la recta, sino que está ligeramente desplazado de ella. Por ello va a existir una distancia que separa cada punto, de su correspondiente valor de la recta. Esta distancia es la que buscamos minimizar, ya que cuanto menor sea esta distancia, significará que mejor es este ajuste.

Esta distancia se puede expresar como:

$$(d_j) = (y_j - (a + b \cdot s_j))$$

Siendo yj el valor que toma cada punto rojo, y (a+b*sj) el valor que toma la recta en el concreto valor de x.

Como la distancia puede ser negativa (los puntos de la nube estarían por debajo de la recta), o positiva (por encima), elevamos al cuadrado la distancia. Obtenemos por lo tanto la siguiente expresión:

$$(d_j)^2 = (y_j - (a + b \cdot s_j))^2$$

Como queremos minimizar la función para TODOS los puntos, necesitamos sumar todas estas distancias y encontrar la “suma mínima” de ellas para encontrar la función que mejor se ajusta a nuestra nube de puntos. Lo expresamos de la siguiente manera:

$$f(a,b) = \sum_{j=1}^{n} d_j^2 = \sum_{j=1}^{n} (y_j - (a + b \cdot s_j))^2$$

Lo siguiente que debemos hacer es minimizar la función. Para buscar los máximos o mínimos de una función, se iguala la derivada a 0. En este caso, nuestra función depende de más de una variable (a, b), y por lo tanto, necesitaremos utilizar las derivadas parciales.

Calculamos la derivada respecto de a y la igualamos a 0:

(1) $$\frac{\partial f}{\partial a} = 2\sum_{j=1}^{n}\left[(y_j - (a + b \cdot s_j))(-1)\right] = 0$$

Hacemos lo mismo para la variable b y la igualamos a 0:

(2) $$\frac{\partial f}{\partial b} = 2\sum_{j=1}^{n}\left[(y_j - (a + b \cdot s_j))(-s_j)\right] = 0$$

Ya tenemos las dos ecuaciones para obtener los valores a y b de nuestra recta. Ahora solo queda operar.

Para despejar, me llevo a la derecha lo que no depende de a y b; y quito los “2” que me quedan a cada lado:

(1) $$\cancel{2}\sum_{j=1}^{n}(a+b\cdot s_j) = \cancel{2}\sum_{j=1}^{n} y_j$$

(2) $$\cancel{2}\sum_{j=1}^{n}((a+b\cdot s_j)\cdot s_j) = \cancel{2}\sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j$$

Seguimos operando:

En la primera ecuación, teniendo en cuenta que tanto a como b son constantes, y como *a* n veces es lo mismo que *a*n,* simplificamos:

(1) $$n \cdot a + b \cdot \sum_{j=1}^{n} b\cdot s_j = \sum_{j=1}^{n} y_j$$

(2) $$a \cdot \sum_{j=1}^{n} s_j + b\cdot\sum_{j=1}^{n} s_j{}^2 = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j$$

Ahora, solo nos queda resolver el sistema de ecuaciones. Por simplicidad, utilizaremos la siguiente notación:

$$SX = \sum_{j=1}^{n} s_j \qquad SY = y_j \qquad SX^2 = \sum_{j=1}^{n} s_j^{\;2} \qquad SXY = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j$$

Por lo tanto, nuestro sistema de ecuaciones se reduce a:

$$\left\{\begin{matrix} n \cdot a + b \cdot SX = SY \\ a \cdot SX + b \cdot SX^2 = SXY \end{matrix}\right\}$$

Ahora que tenemos ya el sistema de ecuaciones solo hay que resolverlo. (No olvidemos que nuestras incógnitas son siempre a y b, que nos darán la recta que buscamos).

Resolvemos ahora el sistema por Cramer y convertimos nuestro sistema a una ecuación matricial:

$$A \cdot X = F$$

$$A = \begin{pmatrix} n & SX \\ SX & SX2 \end{pmatrix}; \quad X = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}; \quad F = \begin{pmatrix} SY \\ SXY \end{pmatrix}$$

Calculamos ahora el determinante de A (necesario para los cálculos). Lo llamaremos D.

$$D = \begin{vmatrix} n & SX \\ SX & SX2 \end{vmatrix} = n \cdot SX2 - (SX)^2$$

Una vez hemos calculado dicho determinante podemos calcular nuestras incógnitas:

$$a = \frac{\begin{vmatrix} SY & SX \\ SXY & SX2 \end{vmatrix}}{D} = \frac{1}{D}(SY \cdot SX2 - SX \cdot SXY)$$

$$b = \frac{\begin{vmatrix} n & SY \\ SX & SXY \end{vmatrix}}{D} = \frac{1}{D}(n \cdot SXY - SX \cdot SY)$$

Una vez ya tenemos despejado nuestras incógnitas debemos volver a la notación original.

No olvidemos que inicialmente concretamos que:

$$SX = \sum_{j=1}^{n} s_j \qquad SY = y_j \qquad SX^2 = \sum_{j=1}^{n} s_j{}^2 \qquad SXY = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j$$

De esta manera, sustituyendo estos valore y el valor de D, obtenemos que:

$$a = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - \sum_{j=1}^{n} s_j \cdot \sum_{j=1}^{n} (y_j s_j)}{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - \left( \sum_{j=1}^{n} s_j \right)^2}$$

$$b = \frac{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (y_j s_j) - \sum_{j=1}^{n} s_j \cdot \sum_{j=1}^{n} y_j}{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - \left( \sum_{j=1}^{n} s_j \right)^2}$$

Y ya habríamos resuelto el ejercicio.

**ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA RECTA DE REGRESIÓN Y LOS VALORES QUE TOMA EN UNA SERIE DE PUNTOS**

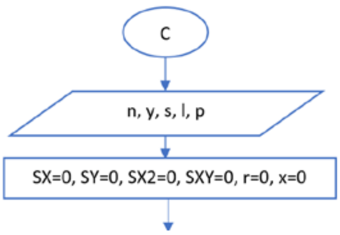
***Dados:***

- ***Un vector s de n componentes que contiene las ABSCISAS de la nube de puntos***
- ***Un vector y de n componentes que contiene las ORDENADAS de la nube de puntos***
- ***Una variable L***
- ***Una variable p***

1. ***CALCULAR los coeficientes a, b***
2. ***OBTENER los valores que toma la recta de regresión en los puntos dados por un vector x cuyos valores sean equidistantes (con p componentes) en un intervalo [0,L]***

En el caso de que nos pidan el algoritmo para calcular los coeficientes para la recta de regresión, entonces debemos tener muy claros todos los conceptos previamente explicados, pues este ejercicio está basado en el anterior.

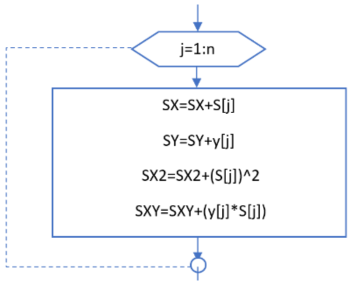
Lo primero de todo necesitamos leer las variables, en este caso serán n, y, s, l, p.

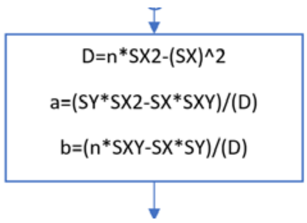



Seguidamente debemos fijar todas las variables de los sumatorios a 0. Para ello utilizaremos la notación anteriormente utilizada: (SX, SY, SXY, SX2).

Por otro lado, debemos iniciar nuestra ecuación de la recta a 0. (r=0), así como el valor de x, que almacenará los valores que toma la recta de regresión en los puntos dados.

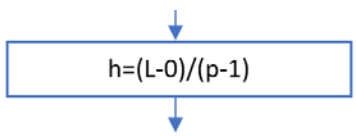
Seguidamente iniciamos un bucle en j desde 1 hasta n, donde calculamos todos los sumatorios. SX, SY, SX2, SXY.

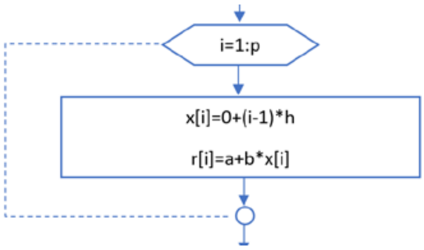



Una vez hemos están calculados, ya podemos definir y calcular el determinante de la matriz A que habíamos llamado D, y nuestras variables a, b de nuestra recta.

Lo siguiente que vamos a realizar es dividir el intervalo [0, L], en segmentos equidistantes. Para ello necesitamos definir un valor h que va a guardar el valor de la distancia entre cada valor equidistante. Para calcular el valor de h restamos los extremos del intervalo y lo dividimos entre el número de puntos menos 1. (Ya que por ejemplo en un segmento de 3 trozos habrá 4 puntos).

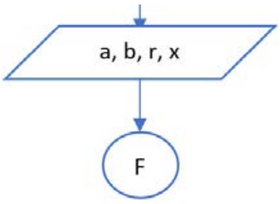




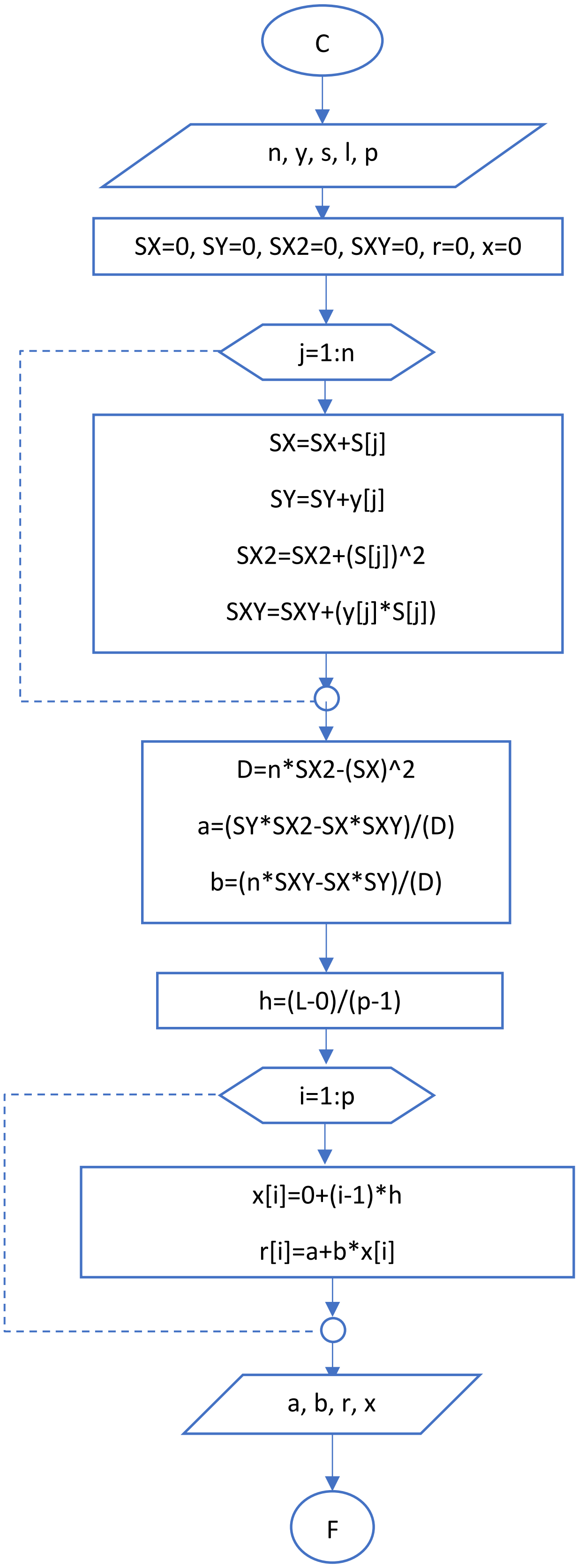

Cuando ya hemos definido h, podemos calcular los valores exactos de estos puntos equidistantes, añadiendo siempre al anterior una distancia h.

Después calculamos para cada valor de x ya obtenidos, su respectivo valor.

Finalmente mostramos los valores de a, b, r, x.




En la siguiente página se puede ver el algoritmo completo:


C
n, y, s, l, p
SX=0, SY=0, SX2=0, SXY=0, r=0, x=0
j=1:n
SX=SX+S[j]
SY=SY+y[j]
SX2=SX2+(S[j])^2
SXY=SXY+(y[j]*S[j])
D=n*SX2-(SX)^2
a=(SY*SX2-SX*SXY)/(D)
b=(n*SXY-SX*SY)/(D)
h=(L-0)/(p-1)
i=1:p
x[i]=0+(i-1)*h
r[i]=a+b*x[i]
a, b, r, x
F