MÉTODO DE AJUSTE DE MÍNIMOS CUADRADOS

En un experimento, en el laboratorio, se midieron dos magnitudes físicas, X e Y, con el propósito de verificar la ley física que las vincula. En consecuencia se obtuvieron N pares de datos (*Xi*, *Yi*), que representados de manera adecuada en un gráfico sugieren la forma de una curva.
Si la relación entre estas magnitudes es lineal, los puntos experimentales representados en la gráfica Y(X) parecen estar sobre una recta: Representemos a ésta recta según la ecuación,

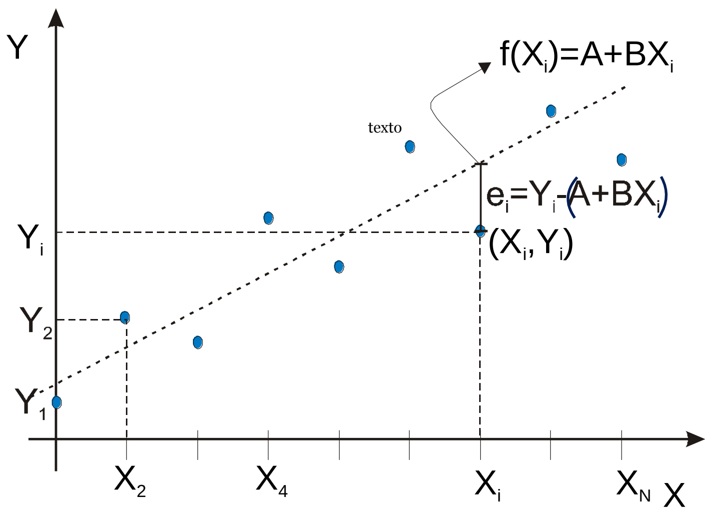
$$Y = A + B \cdot X \qquad (1)$$

Donde A y B son dos parámetros, a determinar, que representan la ordenada al origen y la pendiente de la recta respectivamente. En el método de ajuste de mínimos cuadrado, el objetivo es hallar el par de valores A y B que definen a la recta que mejor ajusta a nuestros datos experimentales, es decir

$$Y_i - (A + B \cdot X_i) = 0 \quad i = 1,2 \ldots N \qquad (2)$$

Sin embargo, dado que los datos experimentales siempre están afectados de un error, la diferencia en la Ecuación (2) no es cero, sino que para cada par de puntos (X_i,Y_i) se observa una diferencia ***ei*** con el valor calculado por la ecuación (1), a esta diferencia se la denomina "desviación vertical":

$$Y_i - (A + B \cdot X_i) = e_i \quad i = 1,2 \ldots N \qquad (3)$$



De las N lecturas (X_i,Y_i) se obtuvieron N desviaciones ***ei***, pero debe notarse que el valor correspondiente a cada ***ei*** depende del valor que se le asigne a los parámetros ***A y B.***
Se considera como valor más acertado para atribuir a los parámetros ***A y B***, aquel que haga mínima la suma de los cuadrados de las desviaciones,

$$S = \sum_{i=1}^{N} e_i^2 \Rightarrow \text{Mínimo} \qquad (4)$$

Observación: *esto es equivalente a pedir que la probabilidad de que las desviaciones verticales sean efectivamente las que aparecen en la medición, sea máxima.*
La condición de valor mínimo para la Ecuación (4) se obtiene pidiendo que las derivadas parciales respecto de los parámetros A y B sean cero,

$$\frac{\partial S}{\partial B} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial S}{\partial A} = 0 \qquad (5)$$

En el caso propuesto:

$$\frac{\partial S}{\partial B} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial (Y_i - A - BX_i)^2}{\partial B} = 2 \cdot \sum_{i=1}^{N} [(Y_i - A - BX_i)(-X_i)] = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial (Y_i - A - BX_i)^2}{\partial A} = 2 \cdot \sum_{i=1}^{N} [(Y_i - A - BX_i)(-1)] = 0$$

de donde resulta el sistema de ecuaciones:

$$\mathrm{B}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} (\mathrm{X_i})^2 + \mathrm{A}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} (\mathrm{X_i}) - \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} (\mathrm{Y_i} \cdot \mathrm{X_i}) = 0 \qquad (6)$$

$$\mathrm{B}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} (\mathrm{X_i}) + \mathrm{A} \cdot \mathrm{N} - \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} (\mathrm{Y_i}) = 0 \qquad (7)$$

La solución de este par de ecuaciones da los valores buscados de A y B, es decir, el de aquellos que cumplen con la condición de la Ecuación (4). En matemática esta manera de ajustar los valores experimentales obtenidos se denomina Regresión Lineal de Y en X. En una calculadora es el modo LR.
La ecuación (3) nos dice que la mejor recta pasa por:

$$\langle \mathrm{X} \rangle = \mathrm{X_c} = \frac{\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{X_i}}{\mathrm{N}} \qquad \text{y} \qquad \langle \mathrm{Y} \rangle = \mathrm{Y_c} = \frac{\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{Y_i}}{\mathrm{N}}$$

es decir, que el punto $\mathrm{G} = (\mathrm{X_C}, \mathrm{Y_C})$ pertenece a la recta que buscamos.

Resolviendo las Ecuaciones (6) y (7), obtenemos los valores buscados para la ordenada al origen, ***A,*** y la pendiente ***B*** de la recta que mejor ajusta a nuestros datos experimentales:

$$\boldsymbol{B} = \frac{\boldsymbol{N}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{Y}_i) - \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{X}_i \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{Y}_i}{(-\boldsymbol{D})} \qquad \textbf{(8a)} \qquad \boldsymbol{A} = \frac{\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{X}_i)^2 \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{Y}_i - \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{X}_i \sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{X}_i\boldsymbol{Y}_i)}{(-\boldsymbol{D})} \qquad \textbf{(8b)}$$

Donde D es una medida de la dispersión de los datos en X

$$D = N\sum_{i=1}^{N}(x_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2$$

► ***¿Qué intervalo de incerteza corresponde asignar a los valores de A y de B determinados?***

La medida de la variación de los valores $\mathrm{Y_i}$ medidos, respecto de los valores calculados, $Y_i = A + B \cdot X_i$, es llamado **error típico de la estimación** σ_Y, Y tiene un significado equivalente al de la desviación típica para una serie de medidas,

$$\sigma_Y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} e_i^2}{(N-2)}}$$

Si tenemos en cuenta que la desviación estándar en los valores medidos de X es mucho menor que la desviación estándar en los valores medidos de Y $(\sigma_X << \sigma_Y)$, podemos afirmar que la desviaciones en el valor de la pendiente, B, y de la ordenada al origen, A, calculadas, se deben casi exclusivamente a la desviaciones en los valores medidos de Y.

Nota: el valor de σ_Y se puede obtener directamente de la calculadora en modo regresión lineal.

Luego, aplicando la relación que permite calcular la desviación estándar de una magnitud que está dada en función de otras variables medidas *(para mayor información ver Apéndice 1)* se llega a la siguiente expresión:

$$\sigma_B \approx \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial B}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_Y^2} \quad y \quad \sigma_A \approx \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial y_i}\right)^2 \sigma_Y^2}$$

Calculando las derivadas parciales de B yA, ecuaciones (8a) y (8b), se obtienen las siguientes expresiones,

$$\sigma_B \approx \sigma_Y \frac{\sqrt{N}}{D} \qquad \sigma_A \approx \sigma_Y \frac{\sqrt{\sum x_i^2}}{D}$$

Y los errores absolutos en la pendiente y ordenada al origen son,

$$E_B = \frac{\sigma_B}{\sqrt{N}} \qquad E_A = \frac{\sigma_A}{\sqrt{N}}$$

Luego, la expresión final para los parámetros de la recta será:

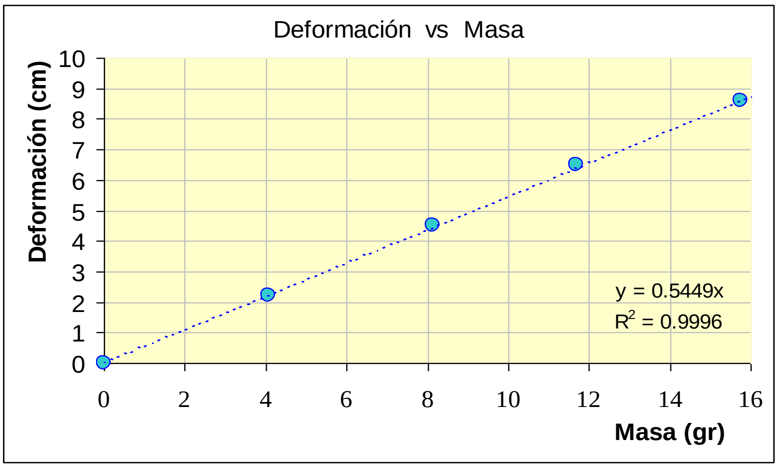
$$\text{Pendiente} \Rightarrow B \pm E_B \qquad \text{Ordenada al origen} \Rightarrow A \pm E_A$$

Observar que el método de cuadrados mínimos, presentado de esta manera, se puede aplicar a funciones no lineales, siempre que la función que relacione los puntos se pueda linealizar (ejemplo $y = bx^a$).

Una medida de la exactitud con que se realizó la regresión lineal, o el ajuste de los datos experimentales a la recta, está dada por el "**coeficiente de correlación**", **R**, definido como:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^{N} X_i Y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N} X_i^2 \sum_{i=1}^{N} Y_i^2}} = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} X_i Y_i - N \cdot X_C Y_C\right)}{N \cdot \sigma_X \cdot \sigma_Y}$$

Una **correlación perfecta** entre la recta y los valores experimentales equivale a **R=1**, en tanto que un ajuste malo, o nada de correlación entre los datos, equivale a $R \approx 0$.



En la figura se muestra el resultado de aplicar el ajuste de mínimos cuadrados a los valores medidos de deformación de un resorte en función de la masa del cuerpo que pende del mismo. Los puntos son los datos experimentales y la línea es la recta de ajuste.

A un costado del gráfico se presenta la ecuación de la recta de ajuste y el valor del coeficiente de correlación.

Bibliografía:

Introducción a las mediciones de laboratorio, A. Maiztegui y R. Gleiser. Ed. Kapeluz – 1980 (En Biblioteca Central)