Ajuste mínimo-cuadrático por funciones especiales susceptibles de linealizar

En los apartados anteriores se han presentado ajustes polinómicos de los que forma parte un ajuste lineal y=a+bx. Sin embargo, no todos los fenómenos físicos, químicos, mecánicos, etc, se ajustan mediante expresiones polinómicas y mucho menos mediante expresiones lineales. En muchos casos, existe la posibilidad de convertir un ajuste inicialmente no lineal en uno lineal mediante un cambio de variable.

Se trata de ajustar una tabla de datos $\{(x_i, y_i)\ ,\ i=1,2\cdots n\}$ mediante una función del tipo exponencial, $y = C \cdot x^A$ **.** Esta función no es lineal**,** sin embargo tomando logaritmos $\ln(y) = A \cdot \ln(x) + \ln(C)$ y haciendo el cambio: $X = \ln(x)\ y\ Y = \ln(y)$, la nueva función que liga a X e Y será $Y = A \cdot X + B,\quad B = \ln(C)$ que es lineal.

En resumen, se transforman los datos iniciales en otros que tienen las mismas abscisas y cuyas ordenadas son los logaritmos de las ordenadas iniciales, y se realiza un ajuste lineal con estos datos, obteniendo la función : $Y = A \cdot X + B$. La función exponencial de ajuste de los datos iniciales sera: $y = C \cdot x^A$ con $C = e^B$. Este procedimiento se puede considerar como una "linealización de los datos".

La siguiente tabla muestra otros casos en los que es posible, mediante un adecuado cambio de variable, obtener la función de ajuste deseada mediante una linealización de los datos.

Función	Forma linealizada Y=AX+B	Cambio de variables y de constantes
$y = \frac{A}{x} + B$	$y = A\left(\frac{1}{x}\right) + B$	$X = \frac{1}{x}; Y = y$
$y = \frac{D}{x+C}$	$\frac{1}{y} = \frac{1}{D}x + \frac{C}{D}$	$X = x; Y = \frac{1}{y}; D = \frac{1}{A}; C = \frac{B}{D}$
$y = \frac{1}{Ax+B}$	$\frac{1}{y} = Ax + B$	$X = x; Y = \frac{1}{y}$
$y = \frac{x}{A+Bx}$	$\frac{1}{y} = A\frac{1}{x} + B$	$X = \frac{1}{x}; Y = \frac{1}{y}$
$y = A \cdot \ln(x) + B$	$y = A \cdot \ln(x) + B$	$X = \ln(x); Y = y$
$y = (Ax+B)^{-2}$	$y^{-\frac{1}{2}} = Ax + B$	$X = x; Y = y^{-\frac{1}{2}}$
$y = C \cdot x \cdot e^{-A \cdot x}$	$\ln\left(\frac{y}{x}\right) = -D \cdot x + \ln(C)$	$X = x; Y = \ln\left(\frac{y}{x}\right); C = e^B$
$y = \frac{1}{1+Ce^{Ax}}$	$\ln\left(\frac{1}{y} - 1\right) = Ax + \ln(C)$	$X = x; Y = \ln\left(\frac{1}{y} - 1\right); C = e^B$

Ejemplo:

Ajustar el conjunto de puntos siguiente mediante una función del tipo $y = Ce^{Ax}$

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	1.5	1	0.73	0.6	0.3	0.2	0.1	0.08

Para transformar la función en una expresión lineal, se toman logaritmos neperianos y resulta: $\ln(y) = \ln(C) + Ax$, con lo que si se hace un cambio de variable Y=ln(y) la expresión se transforma en $Y = Ax + B$, siendo B=ln(C).

El problema se resuelve a continuación como cualquier otro problema de ajuste mínimo-cuadrático discreto.

El sistema de ecuaciones normales que resulta es:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{8} 1 & \sum_{i=1}^{8} x_i \\ \sum_{i=1}^{8} x_i & \sum_{i=1}^{8} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{8} Y_i \\ \sum_{i=1}^{8} Y_i \, x_i \end{pmatrix}$$

Para realizar el cálculo de todos estos sumatorios planteamos la siguiente tabla:

	x_i	y_i	$Y_i=\ln(y_i)$	x_i^2	$Y_i\, x_i$
	1	1.5	0.405465	1	0.405465
	2	1	0	4	0
	3	0.73	-0.314711	9	-0.944132
	4	0.6	-0.510826	16	-2.0433
	5	0.3	-1.20397	25	-6.01986
	6	0.2	-1.60944	36	-9.65663
	7	0.1	-2.30259	49	-16.1181
	8	0.08	-2.52573	64	-20.2058
Σ	36		-8.0618	204	-54.5824

El sistema de ecuaciones lineales resultante es:

$$\begin{pmatrix} 8 & 36 \\ 36 & 204 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -8.0618 \\ -54.5824 \end{pmatrix}$$

Y su solución es: B=0.953451 y A=-0.435817.

La recta que ajusta a los puntos $\{x_i, \ln(y_i)\}$ es: $r(x) = 0.953451 - 0.435817x$

Deshaciendo el cambio de variable resulta que los puntos $\{x_i, y_i\}$ se ajustan a la función: $f(x) = e^{r(x)} = e^{0.953451-0.435817x} = 2.59465e^{-0.435817x}$

Error cometido en el ajuste mínimo-cuadrático.

El concepto básico utilizado en este capítulo es el de calcular una función cuya distancia a otra sea mínima.

El error cometido al utilizar la nueva función f^* en lugar de la función dato del problema se puede evaluar mediante el cálculo de la distancia entre ambas.

Así el error cometido en el ajuste mínimo-cuadrático en general será: $d\left(f, f^*\right) = \left\| f - f^* \right\|$. Por lo tanto, para evaluar el error cometido basta calcular el vector diferencia entre la función dato del problema y la función del ajuste y posteriormente calcular su norma.

Para el caso continuo o el caso discreto se aplicará la norma inducida por el producto escalar utilizado.

-Caso continuo. Error: $\left\| f - f^* \right\| = \sqrt{\int_a^b \left(f(x) - f^*(x) \right) \cdot \left(f(x) - f^*(x) \right) dx}$

- Caso discreto. Error: $\left\| f - f^* \right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f^*(x_i) \right)^2}$

Ejemplo 1 :

En el caso discreto resolvimos el siguiente problema:

Ajustar la función f(x)=-Cos(π(x+1)) en el intervalo [1,3] mediante una parábola.

El resultado del ajuste fue: $\mathrm{p(x)} = -\frac{165}{2\pi^2} + \frac{90}{\pi^2} x - \frac{45}{2\pi^2} x^2$.

El error cometido se calcula de la siguiente manera:

1º.- Calcular el vector diferencia: $f\left(x\right) - p\left(x\right) = Cos\left(\pi(x+1)\right) - \left(-\frac{165}{2\pi^2} + \frac{90}{\pi^2} x - \frac{45}{2\pi^2} x^2 \right)$.

2º.- Calcular la norma de este vector diferencia que será el error cometido en el ajuste:

$$d\left(f(x), p(x) \right) = \left\| f(x) - p(x) \right\| = \sqrt{\int_1^3 \left(Cos\left(\pi(x+1)\right) - \left(-\frac{165}{2\pi^2} + \frac{90}{\pi^2} x - \frac{45}{2\pi^2} x^2 \right) \right)^2 dx} = 3.77182$$

Ejemplo 2 :

Ajustar el conjunto de puntos siguiente mediante un polinomio de grado menor o igual que dos.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	1.5	1	0.73	0.6	0.3	0.2	0.1	0.08

El polinomio resultante es: p(x)= 1.87339-0.4553x+0.02899x^2.

En el caso discreto, se debe calcular la distancia entre el vector **y** y el polinomio p(x), es decir la norma del vector diferencia: $\left\| \boldsymbol{y} - p(x) \right\|$, que es un vector de $\mathbb{R}^n$ cuyas componentes serán $\left\{ y_i - p(x_i) \right\}$.

Para hacer esta operación se utiliza una tabla al igual que se hizo para el cálculo del polinomio p(x)

	x_i	y_i	$p(x_i)$	$y_i - p(x_i)$	$(y_i - p(x_i))^2$
	1	1.5	1.44708	0.05292	0.00280053
	2	1	1.07875	-0.07875	0.00620156
	3	0.73	0.7684	-0.0384	0.00147456
	4	0.6	0.51603	0.08397	0.00705096
	5	0.3	0.32164	-0.02164	0.00046829
	6	0.2	0.18523	0.01477	0.000218153
	7	0.1	0.1068	-0.0068	0.00004624
	8	0.08	0.08635	-0.00635	0.0000403225
Σ	36	4.51			0.0183006

El error es la norma del vector diferencia: $\sqrt{\sum_{i=1}^{8}\left(y_i - p(x_i)\right)^2} = \sqrt{0.0183006} = 0.13528$