

Método de mínimos cuadrados para la aproximación de datos experimentales

Aproximación por rectas que pasan por el origen

A continuación, efectuaremos el cálculo de la pendiente de la recta que pasa por el origen que mejor se aproxima a un conjunto de valores $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ experimentales.

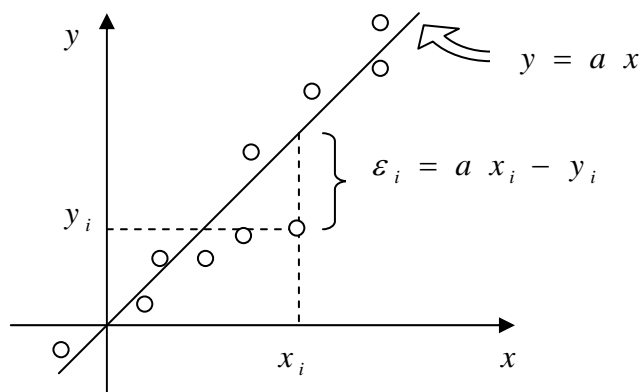
Este procedimiento es de gran importancia debido a que en las experiencias muchas veces las magnitudes físicas dependen linealmente, como por ejemplo, la intensidad de corriente eléctrica es directamente proporcional a la diferencia de potencial en los elementos óhmicos. En reiteradas ocasiones, nos será útil encontrar la pendiente de la recta que mejor aproxime los datos experimentales, debido a que tendrá un importante significado físico. En el ejemplo anterior, la pendiente del gráfico diferencia de potencial (V) en función de la intensidad (I) es la resistencia eléctrica (R) del elemento a estudio. En los casos en los que la relación entre las variables no es lineal, muchas veces se puede linealizar las relaciones para llevarlas a este caso.

Podemos expresar la relación lineal entre ambas magnitudes de la siguiente forma:

$$y = ax$$

En donde a es la pendiente de la recta, o sea, el valor que deseamos hallar. En el ejemplo anterior, y corresponde a la diferencia de potencial (V), x a la intensidad (I), y a es una constante de proporcionalidad, la cual es igual a la resistencia (R) del elemento.

Cuando tratemos datos provenientes de una experiencia, debido a los errores experimentales, generalmente los datos experimentales no satisfarán exactamente dicha ecuación, sino que estarán próximos a la recta, pero no perfectamente alineados. Es decir la distancia de cada punto del gráfico a la recta, calculado como $\varepsilon_i = a x_i - y_i$, no será exactamente cero:



La suma de las distancia de cada punto del gráfico a la recta elevada al cuadrado, que nos da una idea de cuan cerca esta la recta de los datos experimentales, llamada desviación cuadrática de los puntos respecto a la recta, estará dada entonces por la siguiente expresión:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^N (ax_i - y_i)^2 = \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) a^2 - \left(2 \sum_{i=1}^N x_i y_i \right) a + \left(\sum_{i=1}^N y_i^2 \right)$$

Observemos que la desviación cuadrática de los puntos respecto a la recta es una función de la recta, cada recta (o sea cada pendiente a) genera distancias de cada punto a dicha recta y por ende un valor de su suma al cuadrado. Lo que deseamos obtener es la recta (calcular la pendiente a) que minimice dicha función, o sea, obtener la recta que, en cierto sentido, esté más cerca de los puntos experimentales.

Recordemos que para una parábola del tipo $f(x) = Ax^2 + Bx + C$ la abscisa del su vértice es $x = \frac{-B}{2A}$. Si el coeficiente A es positivo, entonces dicha parábola tendrá concavidad positiva y por ende la abscisa del vértice corresponde al valor de x en el que la función $f(x)$ toma su valor mínimo.

La expresión de E como función de a es una parábola, con coeficientes $A = \sum x_i^2$, $B = 2 \sum x_i y_i$, $C = \sum y_i^2$. Observemos que corresponde a una parábola de concavidad positiva, ya que el coeficiente A , el que multiplica a a^2 , es $\sum x_i^2 > 0$.

Ello hace que dicha función tenga un mínimo para un valor de $a = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}$. Dicho valor

de a corresponde a la pendiente de la recta que minimiza la suma de las distancias al cuadrado de cada punto experimental a la misma.

Otra manera de obtener el mismo resultado es pensar que E es una función a , y lo que deseamos es obtener el valor de a que minimiza dicha función. Para lograr dicho objetivo, debemos imponer la siguiente condición de extremo:

$$\frac{dE(a)}{da} = 0$$

Al hacer la derivada de la función E como función de a obtenemos:

$$0 = \frac{dE(a)}{da} = \sum_{i=1}^N 2(y_i - ax_i)x_i = 2 \sum_{i=1}^N x_i y_i - 2 \sum_{i=1}^N ax_i^2 = 2 \sum_{i=1}^N x_i y_i - 2a \sum_{i=1}^N x_i^2$$

$$0 = 2 \sum_{i=1}^N x_i y_i - 2a \sum_{i=1}^N x_i^2 \Leftrightarrow a = \frac{\sum_{i=1}^N x_i y_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2}$$

Cuya solución es la anteriormente citada.

En conclusión, hemos obtenido la pendiente a de la recta de la forma $y = ax$ que mejor aproxima los datos experimentales. Llegamos a la conclusión, que la pendiente de la recta que minimiza la suma de las distancias al cuadrado de los valores experimentales a la recta (la recta que en cierto modo más se aproxima a los valores experimentales) tiene como pendiente:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^N x_i y_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2}$$

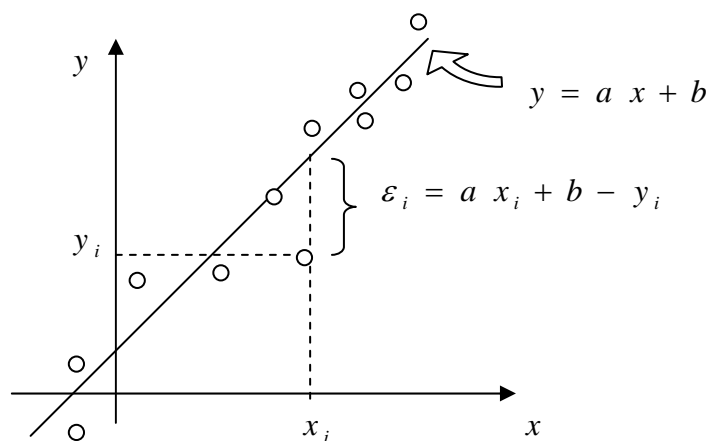
Aproximación por rectas que no necesariamente pasan por el origen

Calculemos ahora la mejor aproximación de un conjunto de valores experimentales $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ por una recta general, que no necesariamente pase por el origen. Podemos expresar la relación entre ambas magnitudes de la siguiente forma:

$$y = ax + b$$

en donde a es la pendiente de la recta y b es el punto de corte de la recta con el eje y , o sea, los valores que deseamos hallar.

Procedamos de la misma manera que en el caso anterior.



Ahora, la distancia de cada punto del gráfico a la recta tendrá la expresión $\varepsilon_i = a x_i - y_i$. Nuevamente calculemos la suma de las distancia de cada punto del gráfico a la recta elevada al cuadrado, que nos da una idea de cuan cerca esta la recta de los datos experimentales. La misma estará dada por la siguiente expresión:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^N (ax_i + b - y_i)^2 = \sum_{i=1}^N (a^2 x_i^2 + b^2 + y_i^2 - 2ax_i y_i - 2by_i + 2abx_i) =$$

$$= a^2 \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) + b^2 \left(\sum_{i=1}^N 1 \right) + ab \left(2 \sum_{i=1}^N x_i \right) + a \left(-2 \sum_{i=1}^N x_i y_i \right) + b \left(-2 \sum_{i=1}^N y_i \right) + \left(\sum_{i=1}^N y_i^2 \right)$$

Observemos que la desviación cuadrática de los puntos respecto a la recta es una función de la recta, cada recta (o sea cada pendiente a y punto de corte b) genera distancias de cada punto a dicha recta y por ende un valor de su suma al cuadrado. Lo que deseamos obtener es la recta (calcular la pendiente a y punto de corte b) que minimice dicha función, o sea, obtener la recta que, en cierto sentido, esté más cerca de los puntos experimentales.

En el caso anterior, cuando las rectas pasan por el origen, la función E dependía de una sola variable, a , y encontrar el valor que la minimizaba fue una tarea sencilla. En este caso la función E depende de dos variables, a y b , y debemos encontrar la pareja de valores que la minimizan. El trabajo es un poco más complicado.

Primeramente hagamos una demostración sin hacer uso de derivadas.

Para un cierto valor dado del parámetro b , podemos pensar la función E como función solo de a :

$$f_b(a) = a^2 \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) + a \left(-2 \sum_{i=1}^N x_i y_i + 2b \sum_{i=1}^N x_i \right) + \left(b^2 \sum_{i=1}^N 1 - 2b \sum_{i=1}^N y_i + \sum_{i=1}^N y_i^2 \right)$$

Para dicho valor de b la función E (como función solamente de a) es una parábola de concavidad positiva, por lo que debemos elegir el valor de a para minimizarla como:

$$a = -\frac{B}{2A} = -\frac{\left(-2 \sum_{i=1}^N x_i y_i + 2b \sum_{i=1}^N x_i \right)}{2 \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right)} = \frac{\sum_{i=1}^N x_i y_i - b \sum_{i=1}^N x_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2}$$

Por otro lado, para un cierto valor dado del parámetro a , podemos pensar la función E como función solo de b :

$$f_a(b) = b^2 \left(\sum_{i=1}^N 1 \right) + b \left(2a \sum_{i=1}^N x_i - 2 \sum_{i=1}^N y_i \right) + \left(\sum_{i=1}^N y_i^2 + a^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2a \sum_{i=1}^N x_i y_i \right)$$

Para dicho valor de a la función E (como función solamente de b) es nuevamente una parábola de concavidad positiva, por lo que debemos elegir el valor de b para minimizarla como:

$$b = -\frac{B}{2A} = -\frac{\left(2a\sum_{i=1}^N x_i - 2\sum_{i=1}^N y_i\right) + \left(-a\sum_{i=1}^N x_i + \sum_{i=1}^N y_i\right)}{2\left(\sum_{i=1}^N 1\right)} = \frac{\sum_{i=1}^N y_i}{\sum_{i=1}^N 1}$$

En definitiva, hemos obtenidos dos relaciones que se deben satisfacer simultáneamente para minimizar la función, E , las que forman un sistema de dos ecuaciones y dos incógnitas:

$$\left\{ \begin{array}{l} a = \frac{\sum_{i=1}^N x_i y_i - b \sum_{i=1}^N x_i}{\sum_{i=1}^N x_i^2} \\ b = \frac{-a \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{i=1}^N y_i}{\sum_{i=1}^N 1} \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} a \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N x_i y_i - b \sum_{i=1}^N x_i \\ b \sum_{i=1}^N 1 = -a \sum_{i=1}^N x_i + \sum_{i=1}^N y_i \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} a \left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right) + b \left(\sum_{i=1}^N x_i\right) = \left(\sum_{i=1}^N x_i y_i\right) \\ a \left(\sum_{i=1}^N x_i\right) + b \left(\sum_{i=1}^N 1\right) = \left(\sum_{i=1}^N y_i\right) \end{array} \right\}$$

Resolviendo dicho sistema de ecuaciones, obtenemos los valores de a y b deseados:

$$a = \frac{N\left(\sum_{i=1}^N x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^N y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N x_i\right)}{N\left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2} \quad b = \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N x_i\right)}{N\left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2}$$

Otra manera más general de obtener el mismo resultado es pensar que E es una función de dos variables, a y b , y lo que deseamos es obtener los valores de a y b que minimizan dicha función. Para lograr dicho objetivo, debemos imponer la siguiente condición de extremo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E(a,b)}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial E(a,b)}{\partial b} = 0 \end{array} \right.$$

Calculando dichas derivadas parciales de la expresión de E como función de a y b , obtenemos:

$$\begin{cases} 0 = \frac{\partial E(a,b)}{\partial a} = 2a \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) + b \left(2 \sum_{i=1}^N x_i \right) + \left(-2 \sum_{i=1}^N x_i y_i \right) \\ 0 = \frac{\partial E(a,b)}{\partial b} = 2b \left(\sum_{i=1}^N 1 \right) + a \left(2 \sum_{i=1}^N x_i \right) + \left(-2 \sum_{i=1}^N y_i \right) \end{cases}$$

Dicho sistema de ecuaciones es el mismo sistema de ecuaciones que habíamos encontrado y por ende tiene las mismas soluciones. Calculando las derivadas segundas se comprueba fácilmente que el punto encontrado es efectivamente el único mínimo de la función E . Este segundo razonamiento es más directo, aunque el anterior no utiliza derivaciones, y por ende puede resultar comprensible si no se conoce el cálculo diferencial.

En conclusión hemos encontrado la pendiente a y el punto de corte el eje y , b , de la recta de la forma $y = ax + b$ que mejor aproxima los datos experimentales. Llegamos a la conclusión que la pendiente y el punto de corte con el eje y de la recta que minimiza la suma de las distancias al cuadrado de los valores experimentales a la recta (la recta que en cierto modo más se aproxima a los valores experimentales) tienen como expresiones:

$$\boxed{\begin{aligned} a &= \frac{N \left(\sum_{i=1}^N x_i y_i \right) - \left(\sum_{i=1}^N y_i \right) \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)}{N \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \\ b &= \frac{\left(\sum_{i=1}^N y_i \right) \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i y_i \right) \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)}{N \left(\sum_{i=1}^N x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2} \end{aligned}}$$

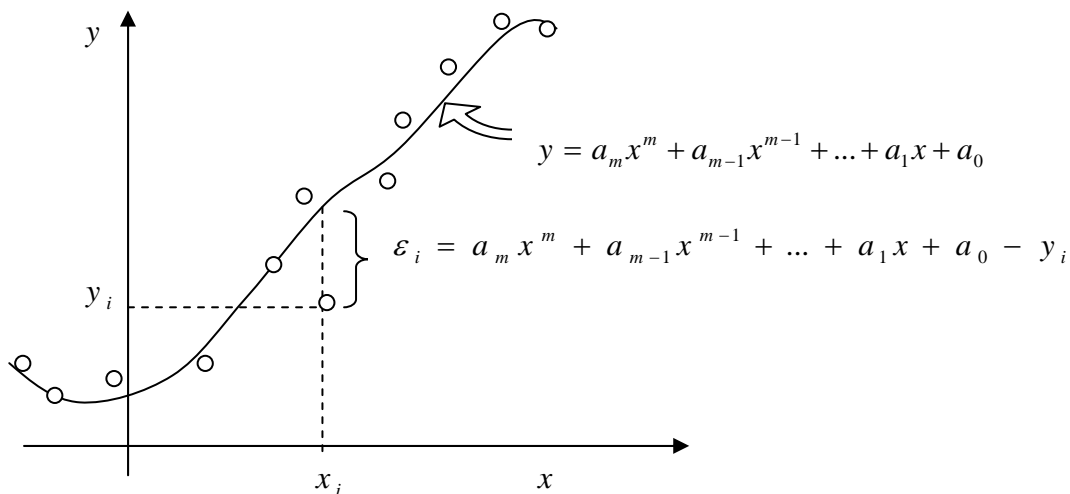
Aproximación por polinomios de grado m

Calculemos ahora la mejor aproximación de un conjunto de valores experimentales $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ por un polinomio de grado m . Podemos expresar la relación entre ambas magnitudes de la siguiente forma:

$$y = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots + a_1 x + a_0$$

en donde los $a_j \quad j = 0, 1, \dots, m$ son los coeficientes del polinomio, o sea, los valores que deseamos hallar.

Procedamos de la misma manera que en los casos anteriores.



Ahora, la distancia de cada punto del gráfico al polinomio tendrá la expresión $\varepsilon_i = a_m x_i^m + a_{m-1} x_i^{m-1} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i$. Nuevamente calculemos la suma de las distancias de cada punto del gráfico al polinomio elevada al cuadrado, que nos da una idea de cuán cerca está el polinomio de los datos experimentales. La misma estará dada por la siguiente expresión:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^N \left(a_m x_i^m + a_{m-1} x_i^{m-1} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i \right)^2$$

Observemos que la desviación cuadrática de los puntos respecto al polinomio es una función del polinomio, cada polinomio (o sea cada conjunto de coeficientes $a_j \quad j = 0, 1, \dots, m$) genera distancias de cada punto a dicho polinomio y por ende un valor de su suma al cuadrado. Lo que deseamos obtener es del polinomio (o sea el conjunto de coeficientes $a_j \quad j = 0, 1, \dots, m$) que minimice dicha función, o sea, obtener el polinomio de grado m que, en cierto sentido, esté más cerca de los puntos experimentales.

En los casos anteriores, cuando teníamos rectas pasan por el origen, la función E dependía de una sola variable, a , y encontrar el valor que la minimizaba fue una tarea sencilla; luego, para rectas generales la función E dependía de dos variables, a y b , y encontrar los valores que la minimizaba fue un poco más complicado. En este caso general, la función E depende de $m+1$ variables $a_j \quad j = 0,1,\dots,m$ y debemos encontrar el conjunto de valores que la minimizan. El trabajo actual es un poco más complicado, aunque es una simple generalización del procedimiento anterior al caso de $m+1$ variables. Para lograr dicho objetivo, debemos imponer la siguiente condición de extremo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E(a_m, a_{m-1}, \dots, a_1, a_0)}{\partial a_0} = 0 \\ \frac{\partial E(a_m, a_{m-1}, \dots, a_1, a_0)}{\partial a_1} = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial E(a_m, a_{m-1}, \dots, a_1, a_0)}{\partial a_m} = 0 \end{array} \right.$$

Calculando dichas derivadas parciales de la expresión de E como función las $m+1$ variables $a_j \quad j = 0,1,\dots,m$, obtenemos:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial E}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^N (a_m x_i^m + a_{m-1} x_i^{m-1} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i) \\ 0 &= \frac{\partial E}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^N (a_m x_i^m + a_{m-1} x_i^{m-1} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i)(x_i) \\ &\vdots \\ 0 &= \frac{\partial E}{\partial a_j} = 2 \sum_{i=1}^n (a_m x_i^m + a_{m-1} x_i^{m-1} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i)(x_i^j) \\ &\vdots \\ 0 &= \frac{\partial E}{\partial a_m} = 2 \sum_{i=1}^n (a_m x_i^m + a_{m-1} x_i^{m-1} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i)(x_i^m) \end{aligned}$$

Dichas ecuaciones pueden ser rescritas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^N y_i &= a_n \sum_{i=1}^N x_i^m + a_{n-1} \cdot \sum_{i=1}^N x_i^{m-1} + \dots + a_1 \cdot \sum_{i=1}^N x_i + a_0 \sum_{i=1}^N 1 \\
\sum_{i=1}^N y_i x_i &= a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} + a_{m-1} \sum_{i=1}^N x_i^m + \dots + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_0 \sum_{i=1}^N x_i \\
&\vdots \\
\sum_{i=1}^N y_i x_i^j &= a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+j} + a_{m-1} \sum_{i=1}^N x_i^{m-1+j} + \dots + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^{1+j} + a_0 \sum_{i=1}^N x_i^j \\
&\vdots \\
\sum_{i=1}^N y_i x_i^m &= a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+j} + a_{m-1} \sum_{i=1}^N x_i^{m-1+m} + \dots + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^{1+m} + a_0 \sum_{i=1}^N x_i^m
\end{aligned}$$

O, para ganar claridad pueden ser escritas en forma matricial de la siguiente manera.

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_i^0 & \sum_{i=1}^N x_i^1 & \sum_{i=1}^N x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^m \\ \sum_{i=1}^N x_i^1 & \sum_{i=1}^N x_i^2 & \sum_{i=1}^N x_i^3 & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} \\ \sum_{i=1}^N x_i^2 & \sum_{i=1}^N x_i^3 & \sum_{i=1}^N x_i^4 & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^N x_i^m & \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} & \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^{2m} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N y_i x_i^0 \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i^1 \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i^2 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i^m \end{bmatrix}$$

Por lo tanto, la solución del sistema es

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = Inv \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_i^0 & \sum_{i=1}^N x_i^1 & \sum_{i=1}^N x_i^2 & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^m \\ \sum_{i=1}^N x_i^1 & \sum_{i=1}^N x_i^2 & \sum_{i=1}^N x_i^3 & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} \\ \sum_{i=1}^N x_i^2 & \sum_{i=1}^N x_i^3 & \sum_{i=1}^N x_i^4 & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^N x_i^m & \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} & \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} & \cdots & \sum_{i=1}^N x_i^{2m} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N y_i x_i^0 \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i^1 \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i^2 \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^N y_i x_i^m \end{bmatrix}$$

En donde $Inv [A]$ significa la matriz inversa de A. En conclusión hemos encontrado el conjunto de coeficientes $a_j \quad j = 0,1,\dots,m$ del polinomio de grado m de la forma $y = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \dots + a_1 x + a_0$ que mejor aproxima los datos experimentales. Llegamos a la conclusión los coeficientes del polinomio de que minimiza la suma de las distancias al cuadrado de los valores experimentales al polinomio (el polinomio que en cierto modo más se aproxima a los valores experimentales) tienen las expresiones anteriormente calculadas.

Aproximación por familias arbitrarias de funciones

En todos los ejemplos anteriores procuramos aproximar un conjunto de datos experimentales $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ por una recta o polinomio. En definitiva, teníamos un conjunto de posibles rectas o polinomios parametrizados por un conjunto de parámetros. Por ejemplo a es el parámetro que describe las rectas que pasan por el origen; a y b es el conjunto de parámetros que describen las rectas generales, y los coeficientes de los polinomios son los parámetros que describen a los polinomios.

En caso general, uno puede tener una familia de funciones f que dependen de varios parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ reales:

$$f_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m}(x)$$

y desea encontrar entre dicha familia de funciones la que mejor aproxima los datos experimentales.

El método de mínimos cuadrados es aplicable en dicha situación. Para ello uno debe considerar las distancias $\varepsilon_i = f(x_i) - y_i$ de los puntos experimentales a la curva de ajuste. Nuevamente consideramos la suma de todas las distancias elevadas al cuadrado:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^N (f(x_i) - y_i)^2$$

La que resulta una función de los parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$, ya que para cada conjunto de parámetros obtenemos una función f y por ende un conjunto de distancias ε_i . Entonces E resulta ser una función de los parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ o sea $E(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$.

El método de mínimos cuadrados consiste en minimizar E , por lo que se debe hacer es imponer la siguiente condición de extremo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)}{\partial \alpha_1} = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial E(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)}{\partial \alpha_m} = 0 \end{array} \right.$$

Obtenemos la solución del problema (los parámetros $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$) al resolver dicho sistema. Además hay que asegurarse de obtener una solución que corresponda efectivamente a un mínimo de E .

La dificultad radica en que generalmente el sistema anterior es un sistema muy complicado de resolver, por lo general no lineal. Afortunadamente disponemos de muchos métodos numéricos para obtener una solución aproximada del mismo.

Mínimos cuadrados ponderados

En todos los ejemplos anteriores calculamos las distancias de los datos experimentales ε_i a una familia de rectas, polinomios o curvas que dependían de ciertos parámetros. Seguidamente sumamos todas las distancias elevadas al cuadrado, y al resultado lo llamamos E . Luego encontramos los parámetros de las rectas o curvas que minimizaban dicha expresión.

Hay situaciones en las que no todos los datos tienen la misma importancia en el cálculo de E . Un ejemplo es cuando hay más incertidumbre asociada a una medición que a las demás. En ese caso uno puede desear que dicha medición tenga menos importancia en el momento de aproximar los datos por rectas o curvas que las restantes. Un posible procedimiento a seguir es el siguiente.

A cada medición se le asocia un peso w_i . Típicamente, se le suele asociar a cada medición un peso que sea inversamente proporcional a la incertidumbre asociada a dicha medida elevada al cuadrado $w_i = \frac{1}{(\Delta y_i)^2}$, aunque otras elecciones son posibles.

En la definición de E , tenemos en cuenta dicho peso:

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 w_i$$

El resto del procedimiento es exactamente igual al de los casos anteriores, o sea minimizamos la expresión obtenida para E , teniendo en cuenta los factores w_i . Observemos que el desarrollo de E es análogo al caso anterior con la diferencia que cada sumando queda multiplicado por el factor de peso w_i . O sea, cada vez que tenemos una sumatoria del tipo $\sum_{i=1}^N \dots_i$ la misma se transformará a una suma del tipo $\sum_{i=1}^N \dots_i w_i$.

Como ejemplo, para el caso de las rectas del tipo forma $y = ax$ obtenemos

$$a = \frac{\sum_{i=1}^N w_i x_i y_i}{\sum_{i=1}^N w_i x_i^2}$$

Para el caso de las rectas del tipo forma $y = ax + b$ obtenemos:

(cabe observar que el factor N en las fórmulas anteriores provenía de hacer $N = \sum_{i=1}^N 1$ y

en los nuevos cálculos se transforma en $\sum_{i=1}^N w_i$.)

$$a = \frac{\left(\sum_{i=1}^N w_i\right)\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^N w_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i\right)}{\left(\sum_{i=1}^N w_i\right)\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N w_i x_i\right)^2}$$

$$b = \frac{\left(\sum_{i=1}^N w_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N w_i x_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i\right)}{\left(\sum_{i=1}^N w_i\right)\left(\sum_{i=1}^N w_i x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N w_i x_i\right)^2}$$

Los métodos y resultados en los demás casos son análogos.