Física experimental 1

Instituto de Física - Facultad de Ingeniería

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

MÉTODO DE MÍNIMOS CUADRADOS

Supongamos que tenemos un modelo de un sistema físico descrito por una función $y = f(x; a, b, c, ...)$, donde a, b, c, etc. son parámetros, y un conjunto de medidas experimentales del sistema físico (x_i, y_i). El problema entonces, es determinar los parámetros a, b, c, ..., que hagan que la función se *ajuste lo mejor posible* a los datos adquiridos. Tenemos que definir o convenir qué significa "ajustar lo mejor posible". Para ello, buscaremos minimizar la suma de los cuadrados de las "distancias"(ver fig.) entre los puntos experimentales y la curva teórica. Esto es:

$$\sum_i E_i^2 = \sum_i (y_i - f(x_i, a, b, c, ...))^2 \tag{1}$$

Para minimizar esta función con respecto a los parámetros, buscaremos los valores de los parámetros a_{min}, b_{min}, c_{min}, ..., que cumplan:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum_i (y_i - f(x_i; a, b, c, ...))^2}{\partial a} &= 0 \\ \frac{\partial \sum_i (y_i - f(x_i; a, b, c, ...))^2}{\partial b} &= 0 \end{aligned} \tag{2}$$

y así para los otros parámetros (esta condición es análoga a la que debe satisfacer una función de una variable, $f(x)$, para presentar un extremo en $x = x_0$; la derivada en este punto debe ser nula: $f'(x_0) = 0$). Los valores que obtengamos del sistema de ecuaciones 2 serán los valores buscados.

Vamos a ilustrar ahora lo anterior con un ejemplo. Supongamos que modelamos la relación entre dos magnitudes x e y por:

$$y = f(x; a, b) = ax + b \tag{3}$$

En general no existirán valores de a y b que logren que la recta por ellos definida pase por *todos* los puntos medidos, debido a los diferentes tipos de errores cometidos al medir.

El problema es entonces, dado el conjunto de medidas (x_i, y_i), con $i = 1, 2, ..., n$; evaluar del mejor modo posible los parámetros a y b, de manera de obtener la recta que *mejor* se aproxime a todos los puntos.

Sea entonces una recta de coeficientes a y b como se observa en la figura. Llamemos y_{iteo} a la ordenada en el punto de la recta que tiene abscisa x_i y cumple la relación teórica: $y_{iteo} = ax_i + b$. La distancia que hay de ese punto al valor medio será $E_i =| y_i - y_{iteo} |$. Tomaremos entonces como una buena estimación de la desviación de las observaciones con respecto a esta recta, el valor:

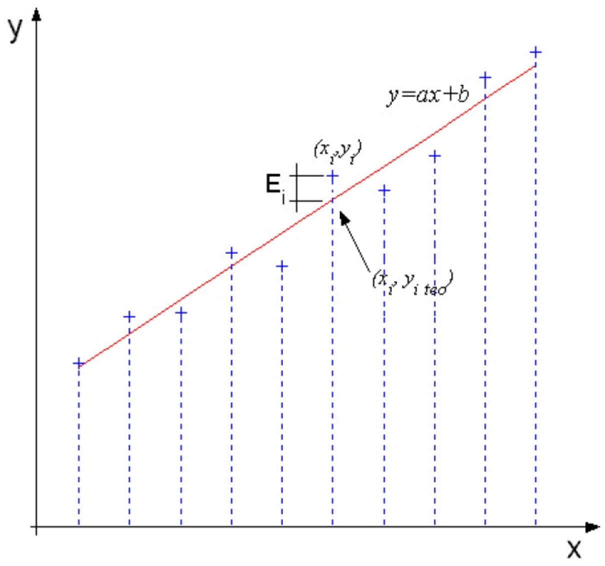

Figura 1

$$\sum E_i^2 = \sum (y_i - (ax_i + b))^2 \tag{4}$$

donde 4 es un caso particular de 1. Observe que es función solamente de a y b, porque los x_i e y_i son conocidos.

Los valores de a y b para los cuales esta expresión es mínima son aquellos que cumplen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum E_i^2}{\partial a} &= 0 \\ \frac{\partial \sum E_i^2}{\partial b} &= 0 \end{aligned} \tag{5}$$

de donde, sustituyendo por 4 y resolviendo estas ecuaciones obtenemos:

$$a_{min} = \frac{(n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i)}{(n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2)} \tag{6}$$

$$b_{min} = \frac{(\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i)}{(n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2)} \tag{7}$$

Se sugiere al estudiante verificar estos resultados.

Veamos ahora cómo saber en forma cuantitativa si el ajuste por el modelo lineal es *bueno*. Para ello se define el *coeficiente de correlación*:

$$r = \frac{cov(x, y)}{\sigma_x \sigma_y} \tag{8}$$

donde $cov(x, y)$ representa la covarianza, definida por:

$$cov(x, y) = \frac{\sum x_i y_i - (1/n) (\sum x_i \sum y_i)}{(n-1)} \tag{9}$$

y σ_x y σ_y son las desviaciones cuadráticas medias de x e y respectivamente:

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

y una relación análoga para σ_y.

Se puede ver que por su definición $0 \leq\mid r \mid\leq 1$, y dentro de este intervalo podemos distinguir tres casos:

- $\mid r \mid\approx 1$ implica correlación lineal fuerte ($r = -1$ implica una relación lineal con pendiente negativa).
- $\mid r \mid\approx 0$ implica correlación nula, esto es, que las magnitudes x e y no están relacionadas.
- $0 <\mid r \mid< 1$ implica correlación estadística.

Las definiciones anteriores nos permiten obtener expresiones sencillas para las incertidumbres de a y b. Usando los resultados anteriores se llega finalmente a:

$$\sigma_a =\mid a \mid \left[\left(1/r^2\right) - 1\right]^{1/2} / \sqrt{(n-2)} \tag{10}$$

y para b:

$$\sigma_b = \sigma_a \left[\left(\sum x_i^2\right) / n\right]^{1/2} \tag{11}$$

Ejercicio: Verifique que las siguientes relaciones se pueden llevar a una forma $u = Av + B$. Determine A y B en función de a y b:

1. $Y = bX^a \Rightarrow \log Y = \log b + a \log X$ $\qquad u = \log Y; v = \log X$
2. $Y = be^{aX} \Rightarrow \ln Y = \ln b + aX$ $\qquad u = \ln Y; v = X$
3. $Y = \frac{a}{b+X} \Rightarrow \frac{1}{Y} = \frac{b}{a} + \frac{X}{a}$ $\qquad u = \frac{1}{Y}; v = X$