Física Experimental 1

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, entendiendo por ello los que minimicen la suma de los cuadrados de las "distancias"(Figura 1) entre los puntos experimentales y la curva teórica. Esto es:

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

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

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

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.

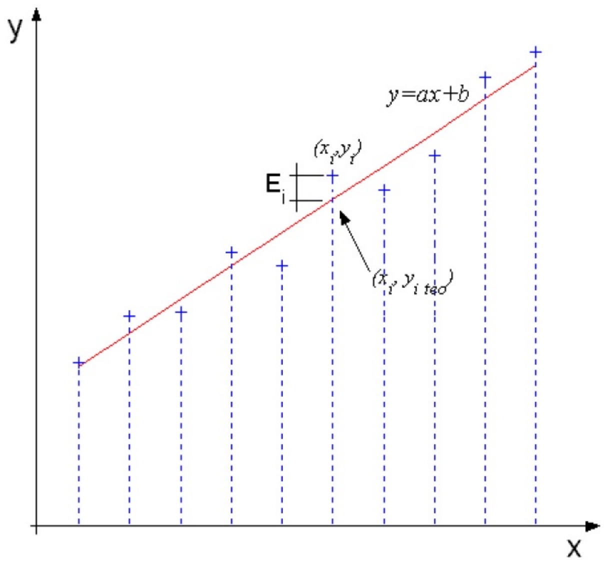


Figura 1: Distancias entre los puntos experimentales y la curva teórica.

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 1. 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 medido será $E_i =\mid y_i - y_{iteo} \mid$. Tomaremos entonces como una buena estimación de la desviación de las observaciones con respecto a esta recta, el valor:

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

donde la Ec. (4) es un caso particular de la Ec. (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:

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

de donde, sustituyendo por la Ec. (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:

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

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

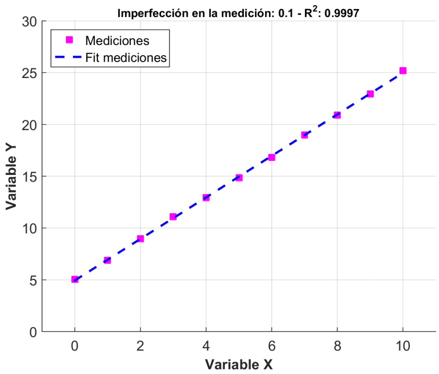
$$\sigma_x^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(x_i - \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}\right)^2}{n-1}$$

y una relación análoga para σ_y.

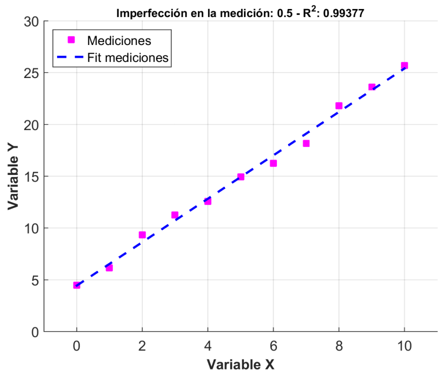
Se puede ver que por su definición $0 \leq\mid r \mid\leq 1$, y dentro de este intervalo podemos distinguir tres casos:

- $\mid r \mid\approx 1$ 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.

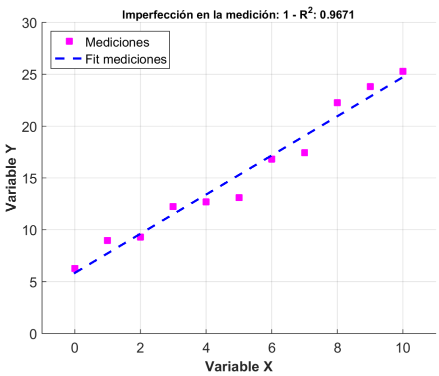
Muchos programas que computan el método de mínimos cuadrados, dan a la salida otro parámetro de interés denominado R_{sq} ó R^2 que se define, en el caso de un modelo lineal, simplemente como el cuadrado del coeficiente de correlación: $R_{\mathrm{sq}} = R^2 = r^2$. Este parámetro toma valores entre 0 y 1 y cuánto más cercano a la unidad sea, mejor es el ajuste entre el modelo teórico y los datos experimentales. Algunos ejemplos de ello se ven en la Figura 2, donde se muestran en cuadrados violetas diferentes observaciones de un mismo experimento, realizadas cada vez bajo condiciones de mayor incertidumbre. Se muestra en línea punteada azul el modelo lineal que mejor ajusta los datos. Notar que las pendientes de la recta en las primeras cuatro figuras son muy similares, pero en la última es bastante diferente. Esto se debe a que las condiciones de medición[1] del último conjunto de datos está lejos de ser óptimo.



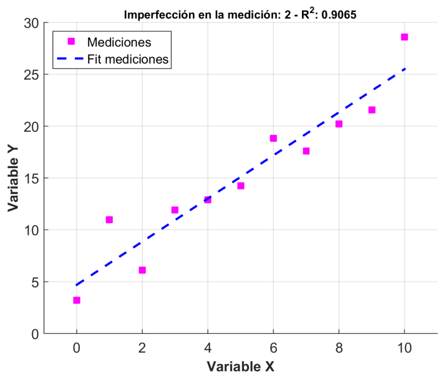
(a)



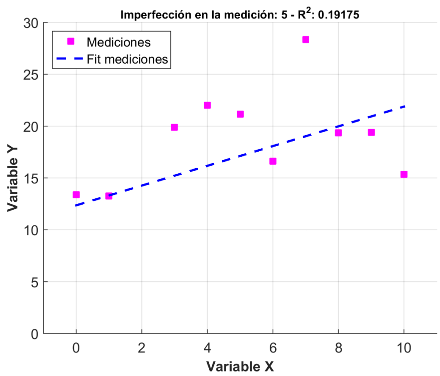
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 2: Ejemplos de aplicación del método de Mínimos Cuadrados a diferentes mediciones, utilizando un modelo lineal. (a) R^2=0,99970, (b) R^2=0,99377, (c) R^2=0,96710, (d) R^2=0,90650 y (e) R^2=0,19175

[1] Esto es posible afirmarlo tan fehacientemente debido a que el conjunto de datos aquí mostrado fue construido a partir de un cierto modelo agregando ruido a las mediciones.

Incertidumbres de los parámetros Las definiciones anteriores nos permiten obtener expresiones sencillas para las incertidumbres de a y b. Usando los resultados anteriores se puede encontrar una expresión para σ_a y σ_b de la forma:

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

y para b:

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

En el ejemplo que se trabajó anteriormente, el modelo teórico es lineal. En los casos en que el modelo no sea lineal, es posible de todas formas aplicar el método de mínimos cuadrados, minimizando las distancias de los puntos experimentales a la función que corresponda. En muchos casos es posible mediante un cambio de variable, reescribir la ecuación teórica en forma lineal. De esa forma podemos aplicar el método de mínimos cuadrados tal como fue explicado en el ejemplo.

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