

UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL CUSCO
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO ACADÉMICO DE MATEMÁTICAS Y ESTADÍSTICA



UNSAAC

Lic. Guillermo Mario, Chuquipoma Pacheco

mariochuqui@hotmail.com

www.mariochuqui.webs.com

Regresión

Regresión Lineal

Se desea ajustar un serie de puntos (x_i, y_i) a una línea recta dada por:

$$y = a_0 + a_1x + e$$

Donde a_0 y a_1 son coeficientes que representan la intersección con el eje y la pendiente, y e es el error, o diferencia, entre el modelo y las observaciones.

$$e = y - a_0 - a_1x$$

Criterio del mejor ajuste

En el método de mínimos cuadrados se desea minimizar la suma de los cuadrados de los residuos.

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,medida} - y_{i,modelo})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

Ajuste por mínimos cuadrados

Derivando respecto a a_0 y a_1 .

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,medida} - y_{i,modelo})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

Obtenemos

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum [(y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i]$$

Igualando a 0

$$0 = \sum y_i - \sum a_0 - \sum a_1 x_i$$

$$0 = \sum y_i x_i - \sum a_0 x_i - \sum a_1 x_i^2$$

Resolviendo para a_0 y a_1

$$a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x}$$

Ejemplo

Ajustar con mínimos cuadrados los siguientes datos

X	Y
1	0.5
2	2.5
3	2.0
4	4.0
5	3.5
6	6.0
7	5.5

Tarea

Ajustar con mínimos cuadrados los siguientes datos

X	Y
0	5
2	6
4	7
6	6
9	9
11	8
12	7
15	10
17	12
19	12

Estadística básica

Promedio: $\bar{y} = \frac{\sum y_i}{n}$

Desviación estándar $s_y = \sqrt{\frac{S_t}{n-1}}$ $S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$

Varianza: $s_y^2 = \frac{S_t}{n-1}$ $s_y^2 = \frac{\sum y_i^2 - (\sum y_i)^2 / n}{n-1}$

Coefficiente de variación: $c.v. = \frac{s_y}{\bar{y}} 100\%$

Estimado normal estándar: $t = \frac{\bar{y} - \mu}{s_y / \sqrt{n}}$

Tarea

Escriba una función en C que calcule la recta del mejor ajuste utilizando mínimos cuadrados.

Escriba un archivo M para graficar la recta del mejor ajuste utilizando mínimos cuadrados.

Escriba funciones en C para calcular el valor promedio, la desviación estándar y la varianza de un arreglo de datos.

Error en la regresión lineal

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

La desviación estándar de la línea de regresión es:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}}$$

La magnitud del error residual antes de la regresión es:

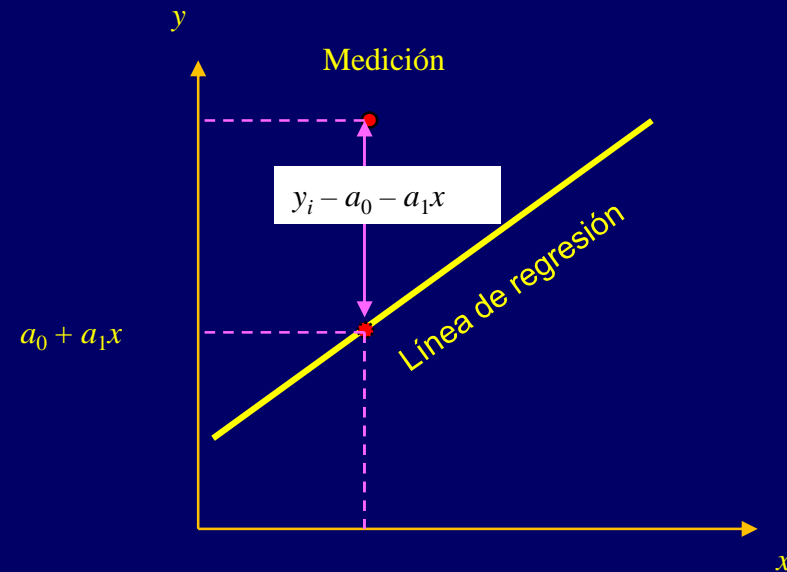
$$S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$$

El coeficiente de determinación es:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

El coeficiente de correlación es:

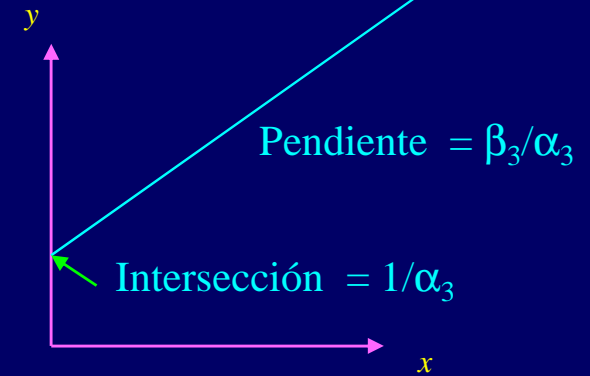
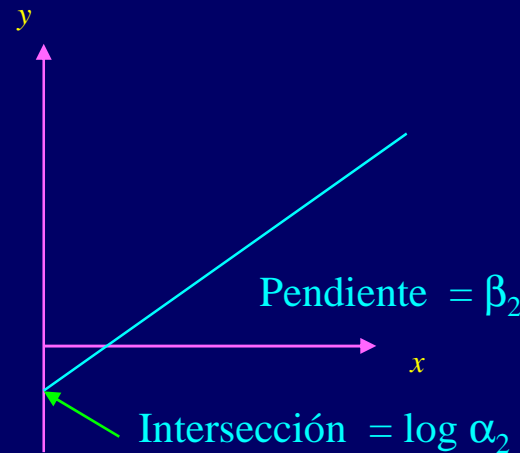
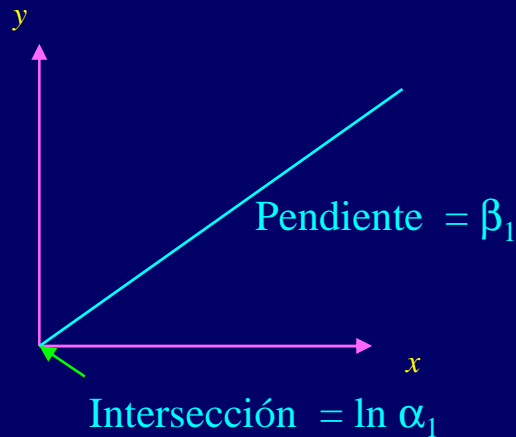
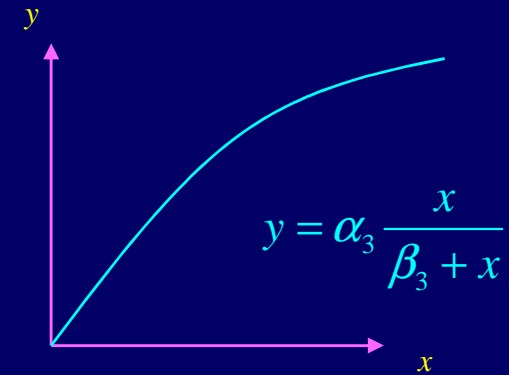
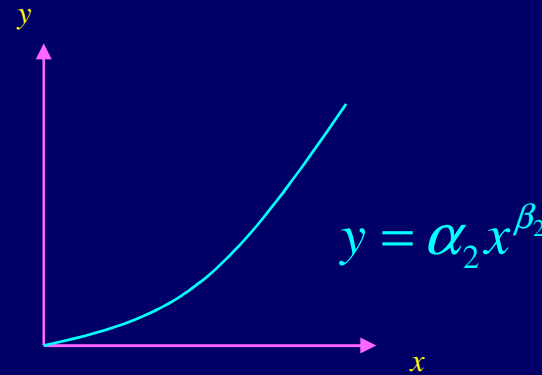
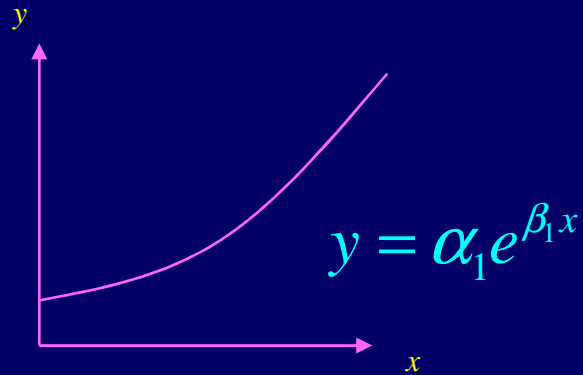
$$r = \sqrt{r^2} = \frac{n \sum x_i y_i - (\sum x_i)(\sum y_i)}{\sqrt{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \sqrt{n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2}}$$



En ajuste perfecto $S_r = 0$ y $r = r^2 = 1$.

Si $r = r^2 = 0$, $S_r = S_t$, el ajuste no representa alguna mejora.

Linealización de relaciones no lineales



Ejemplo

Ajustar los siguientes datos a $y = \alpha_2 x^{\beta_2}$

x	y
1	0.5
2	1.7
3	3.4
4	5.7
5	8.4

ejemplo

Usar regresión de mínimos cuadrados para ajustar a una ecuación de tasa de crecimiento de saturación.

$$y = \alpha_3 \frac{x}{\beta_3 + x}$$

x	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
y	17	24	31	33	37	37	40	40	42	41

$$\frac{1}{y} = \frac{1}{\alpha_3} \frac{\beta_3 + x}{x} = \frac{\beta_3}{\alpha_3} \frac{1}{x} + \frac{1}{\alpha_3}$$

Tarea

Dados los datos siguientes use regresión por mínimos cuadrados para ajustar a) una línea recta, b) una ecuación exponencial, c) una ecuación de potencias.

x	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
y	17	24	31	33	37	37	40	40	42	41

Regresión Polinomial

Ajuste a un polinomio cuadrático

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + e$$

La suma de los cuadrados de los residuos es:

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 + a_1x_i - a_2x_i^2)^2$$

De aquí obtenemos:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum (y_i - a_0 + a_1x_i - a_2x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum x_i (y_i - a_0 + a_1x_i - a_2x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2 \sum x_i^2 (y_i - a_0 + a_1x_i - a_2x_i^2)$$

Reordenando se obtiene

$$na_0 + \left(\sum x_i\right)a_1 + \left(\sum x_i^2\right)a_2 = \sum y_i$$

$$\left(\sum x_i\right)a_0 + \left(\sum x_i^2\right)a_1 + \left(\sum x_i^3\right)a_2 = \sum y_i x_i$$

$$\left(\sum x_i^2\right)a_0 + \left(\sum x_i^3\right)a_1 + \left(\sum x_i^4\right)a_2 = \sum x_i^2 y_i$$

El error estándar es:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-3}}$$

Ejemplo

Ajustar a un polinomio de segundo grado.

x	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
y	17	24	31	33	37	37	40	40	42	41

Tarea

Ajustar a un polinomio de segundo grado.

x	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
y	17	24	31	33	37	37	40	40	42	41

Escriba una función en C que calcule el polinomio de segundo grado del mejor ajuste utilizando mínimos cuadrados.

Escriba un archivo M para graficar el polinomio de segundo grado del mejor ajuste utilizando mínimos cuadrados.

Regresión polinomial en C

```
void regrePoly(double x[],double y[],int n,int m,double
a[][20])
{
    int i,j,k,l;
    double sum;
    for(i = 0; i<m+1; i++){
        for(j = 0; j<=i; j++){
            k = i+j;
            sum = 0;
            for(l = 0; l<n; l++)
                sum += pow(x[l],k);
            a[i][j] = sum;
            a[j][i] = sum;
        }
        sum = 0;
        for(l = 0; l<n; l++)
            sum += y[l]*pow(x[l],i);
        a[i][m+1] = sum;
    }
}
```

Ejemplo de uso

```
main(){
    int j;
    double a[20],b[20][20];
    double x[]={0,1,2,3,4,5};
    double y[]={2.1,7.7,13.6,27.2,40.9,61.1};
    int n=6;
    regrePoly(x,y,6,2,b);
    print(b,3);
    gauss(b,3,a);
    for(j=0; j<3; j++)
        cout << a[j]<<"\n";
    system("PAUSE");
}
```

6	15	55	152.6
15	55	225	585.6
55	225	979	2488.8
2.47857			
2.35929			
1.86071			

Si estoy enojado y...



UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN ANTONIO ABAD DEL CUSCO
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO ACADÉMICO DE MATEMÁTICAS Y ESTADÍSTICA



UNSAAC

Lic. Guillermo Mario, Chuquipoma Pacheco

mariochuqui@hotmail.com

www.mariochuqui.webs.com