

Cuadrados Mínimos

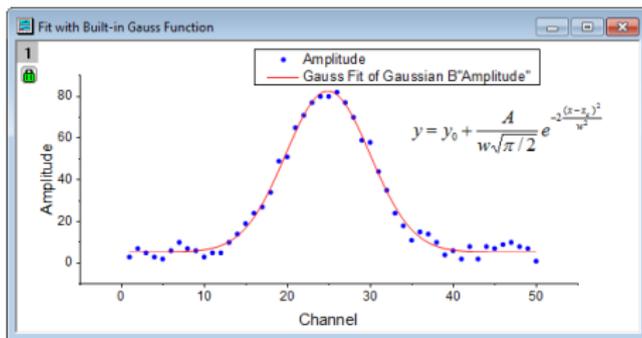
Diego Luna

May 8, 2017

Motivación

Dado un número de observaciones, puede requerirse el ajuste a un modelo

Ejemplo¹ :



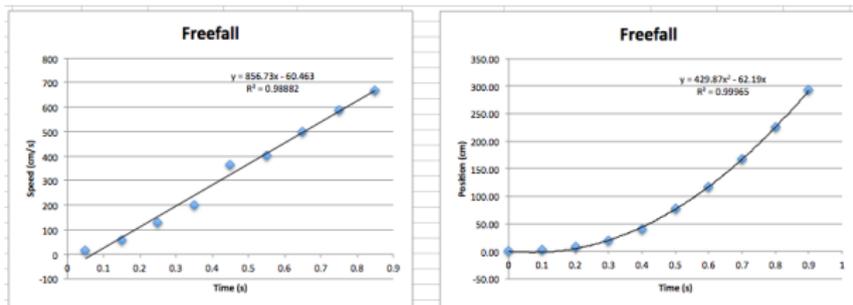
Parámetros: y_0, w, x_C, A

Curva roja: modelo

Puntos azules: mediciones

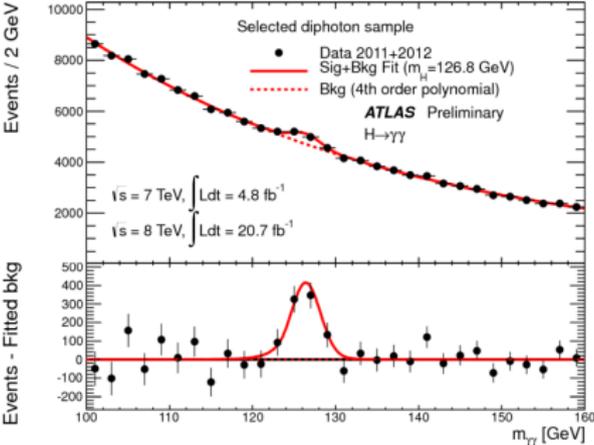
¹<http://www.originlab.com/index.aspx?go=Products/Origin/DataAnalysis/CurveFitting>

Ejemplo: Caída libre



Motivación

Ejemplo: Bosón de Higgs



Curva roja: modelo

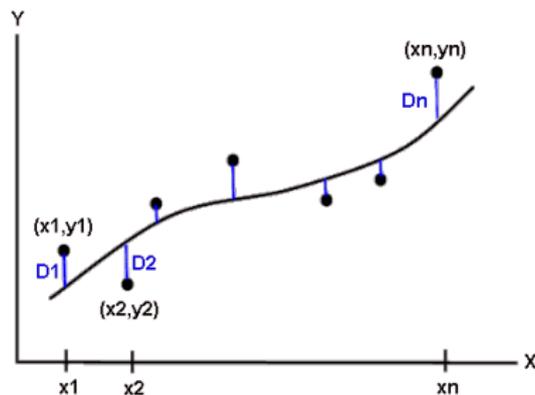
Puntos negros: mediciones e incertidumbres

Se busca la función que mejor ajuste a los valores

Un buen proceso de ajuste debe incluir:

- 1 Parámetros de ajuste
- 2 Incertidumbres en los parámetros
- 3 Medida estadística de la bondad del ajuste

Cuadrados mínimos



Ejemplo: Tengo x_i, y_i, σ_i mediciones y un modelo $y(x, a_1, a_2, \dots, a_M)$

- x_i, y_i : Mediciones
- σ_i : Incertidumbres de las mediciones y_i
- $y(x, a_1, a_2, \dots, a_M)$: Modelo físico que quiero verificar
- a_1, a_2, \dots, a_M : Parámetros que quiero determinar
- D_i : Distancia de la medición a la curva

Cuadrados mínimos

- La idea central en la técnica de cuadrados mínimos es minimizar la suma del cuadrado de las distancias a la curva.
- Pero ponderando según la incertidumbre de medición que tenga cada punto
- Vamos a estudiar el caso en que las incertidumbres en x son despreciables frente a las de y .

Ejemplo: Tengo x_i, y_i, σ_i mediciones y un modelo $y(x, a_1, a_2, \dots, a_M)$

La mejor aproximación se obtiene de minimizar:

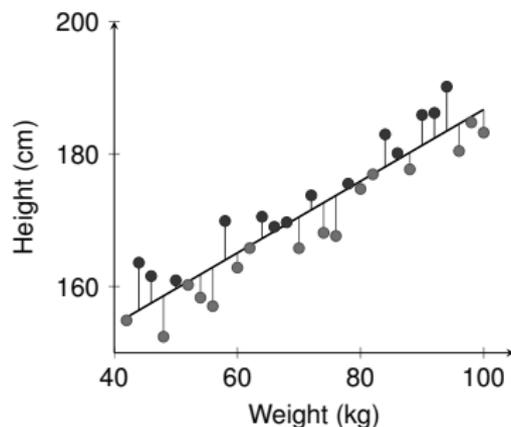
$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{D_i}{\sigma_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{y_i - y(x_i, a_1, a_2, \dots, a_M)}{\sigma_i} \right)^2 \quad (1)$$

Cuadrados mínimos: regresión lineal

Tengo N mediciones x_i, y_i, σ_i y un modelo $y = a + bx$

La mejor aproximación se obtiene de minimizar:

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



Cuadrados mínimos: regresión lineal

Condición para minimización:

$$\frac{\partial \chi^2(a, b)}{\partial a} = 0$$

$$\frac{\partial \chi^2(a, b)}{\partial b} = 0$$

Definiciones:

- $S \equiv \sum \frac{1}{\sigma_i^2}$
- $S_x \equiv \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2}$
- $S_y \equiv \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2}$

- $S_{xx} \equiv \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$
- $S_{xy} \equiv \sum \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}$
- $\Delta \equiv S S_{xx} - S_x^2$

Pendiente y ordenada

$$a = \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{\Delta} \quad (3)$$

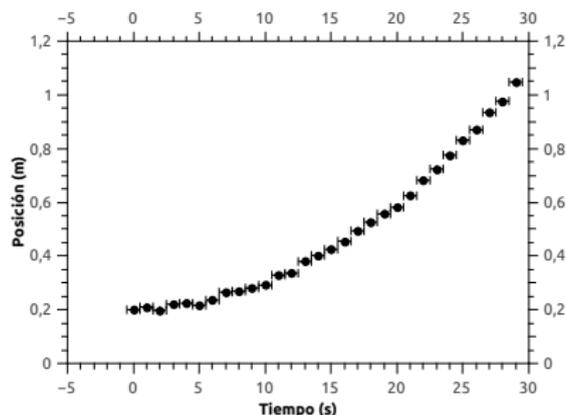
$$b = \frac{S_{xy} S - S_x S_y}{\Delta} \quad (4)$$

Incertidumbres en los parámetros

$$\sigma_a^2 = \frac{S_{xx}}{\Delta} \quad (5)$$

$$\sigma_b^2 = \frac{S}{\Delta} \quad (6)$$

Mediciones de la clase anterior



Tengo estas mediciones. A priori, puedo no conocer la dependencia:

- Modelo 1: $y(t) = Ae^{\alpha t}$ (exponencial)
- Modelo 2: $y(t) = At^{\alpha}$ (ley de potencia)

Mediciones de la clase anterior

Vamos a analizar el Modelo 2. Tareas:

- 1 Desplazar las mediciones para que partan del origen: $y_0 = 0$ y $x_0 = 0$
- 2 **Linealizar** los datos:
 - $y = \alpha t^\beta \Rightarrow \ln(y) = \ln(\alpha) + \beta \ln(t)$
 - $\ln(y) = \ln(\alpha) + \beta \ln(t)$
 - $\ln(t) = \frac{1}{\beta} \ln(y) - \frac{1}{\beta} \ln(\alpha)$
- 3 Decidir qué valores van al eje vertical y cuáles al horizontal
- 4 Propagar incertidumbres. De Δy a $\Delta (\ln(y))$ ó de Δt a $\Delta (\ln(t))$
- 5 Calcular pendiente y ordenada al origen con sus incertidumbres:
¿Está dentro del valor esperado?
- 6 Agregar recta de ajuste en el gráfico

A calcular!

Coeficiente de correlación

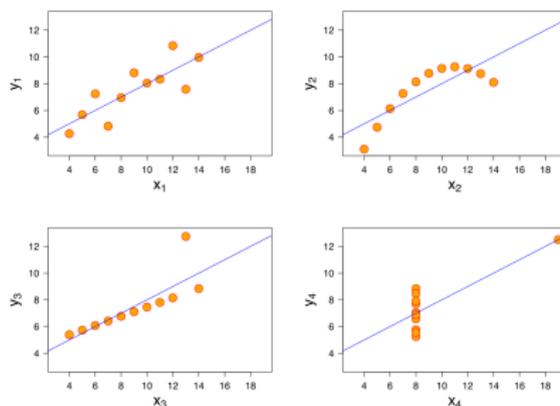
$$r \equiv \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} \equiv \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum (y_i - \bar{y})^2}}$$

Características del estimador r :

- $-1 < r < 1$
- Suele usarse r^2
- Cuánto mas cerca de 1 esté r^2 , " mejor" (entre comillas)

Cuadrados mínimos: regresión lineal

Ojo con el r^2 !



Anscombe's quartet:

- Mismos valor medio y varianza de x .
- Casi mismos valores medios y varianzas de y .
- En los cuatro casos, $r = 0.816$

¿Qué está fallando?

Cuadrados mínimos: regresión lineal

→ La distribución alrededor de la recta no es normal.

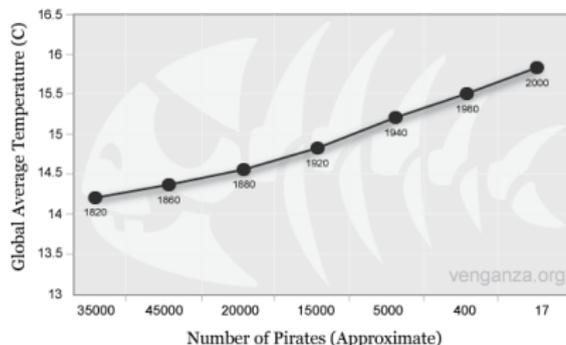
Cuadrados mínimos: regresión lineal

→ La distribución alrededor de la recta no es normal.

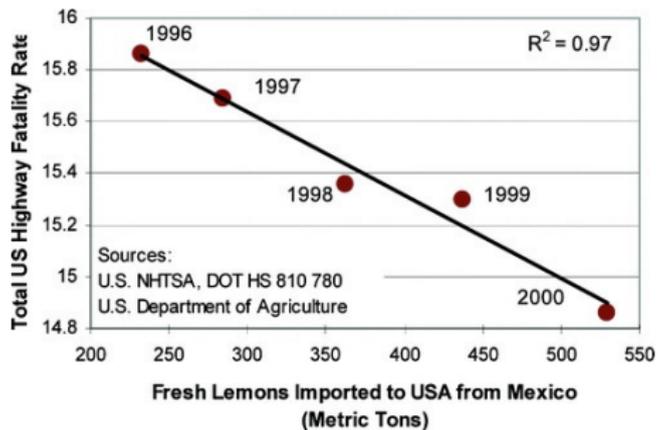
Recordar:

- Siempre hay que graficar (y mirar) los valores
- **CORRELACIÓN NO IMPLICA CAUSALIDAD:**

Global Average Temperature Vs. Number of Pirates



Cuadrados mínimos: regresión lineal



Cuadrados mínimos: chi-test

La expresión de χ^2 puede escribirse como:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(O_i - E_i)^2}{(\sigma_i)^2} \quad (7)$$

- O_i el valor observado (medición)
- E_i el valor esperado. Depende del modelo de medición que se tenga.
Si es una recta, $E_i = a + bx_i$
- σ_i la incertidumbre en cada medición

Si uno hizo las cosas bien $\frac{(O_i - E_i)^2}{(\sigma_i)^2} \sim 1$

Para un ajuste a una recta, $\chi^2 \sim N - 2$ por los grados de libertad.

Tres casos para ajuste lineal:

- $\chi^2 \simeq N - 2$: El modelo es presumiblemente compatible con el experimento.
- $\chi^2 \ll N - 2$: El modelo presumiblemente también es compatible con el experimento, pero las incertidumbres podrían estar sobreestimadas
- $\chi^2 \gg N - 2$: Probablemente, el modelo no ajuste a las mediciones

Cuadrados mínimos: chi-test

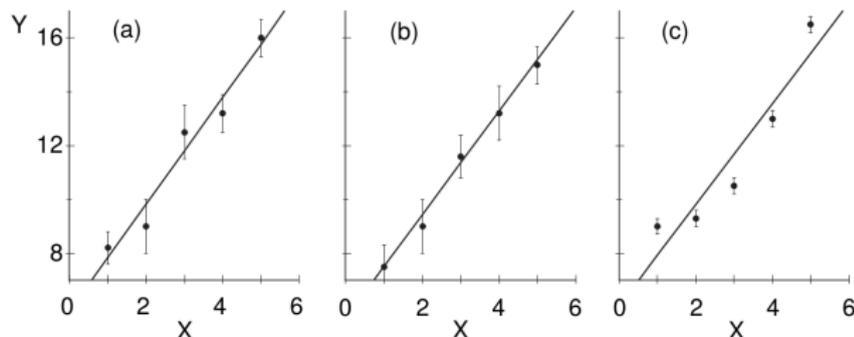
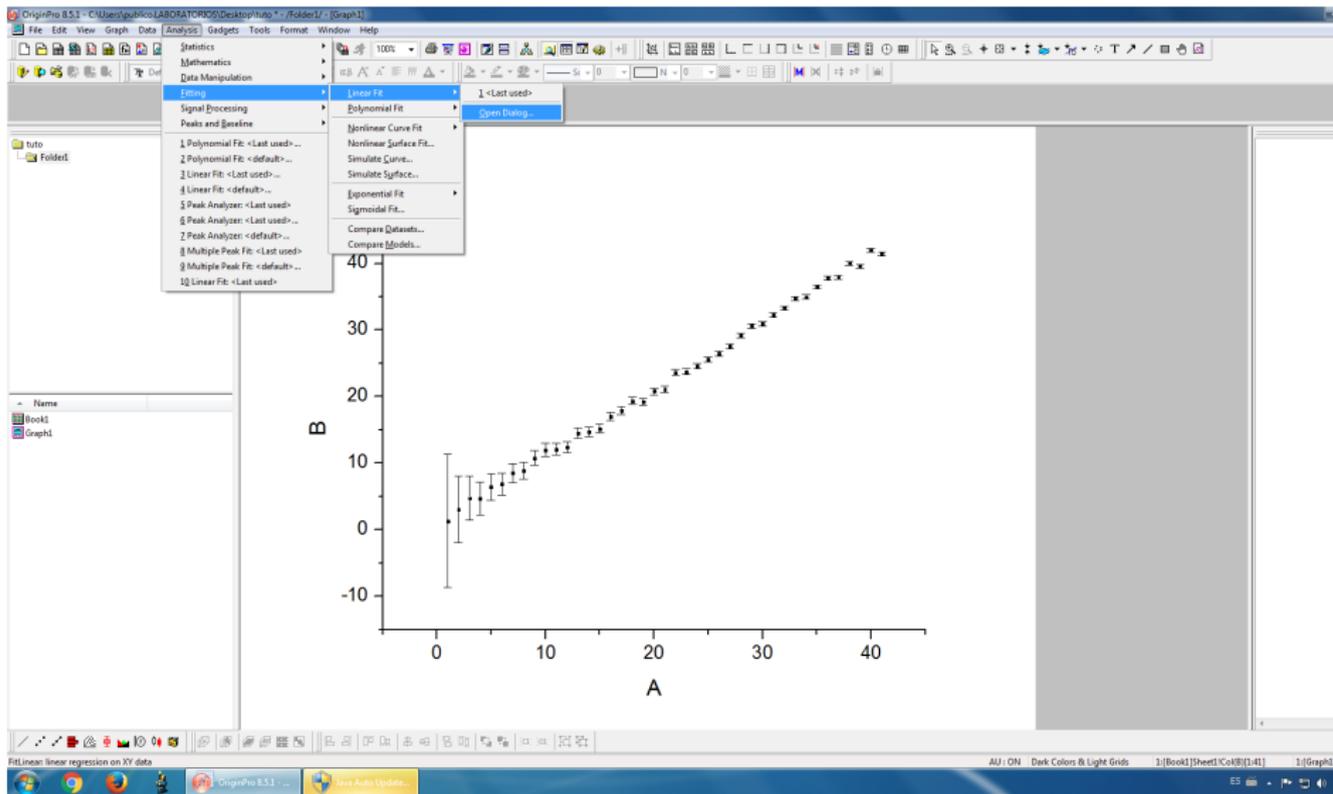


Fig. 11.1. The three graphs show three different situations relative to a linear fit to a set of data points: $\chi^2 \simeq \mathcal{N}$ (left), $\chi^2 \ll \mathcal{N}$ (center), $\chi^2 \gg \mathcal{N}$ (right).

2

Cuadrados mínimos @Origin 8.5:



Cuadrados mínimos @Origin 8.5:

The image shows a screenshot of the Origin 8.5 software interface. The main window displays a scatter plot with error bars. The x-axis is labeled 'A' and ranges from 0 to 20. The y-axis is labeled 'B' and ranges from -10 to 50. The data points show a positive linear trend. A 'Linear Fit' dialog box is open in the foreground, showing the 'Fit Options' section. The 'Fit as 1/Weight' dropdown menu is set to 'Instrumental'. Other options include 'Fix Intercept', 'Fix Slope', 'Use Reduced Chi-Sq', 'Apportion Fit', 'Quantities to Compute', and 'Fit Statistics'. The 'Fit Statistics' section is expanded, showing various statistical measures like 'Number of Points', 'Degrees of Freedom', 'Reduced Chi-Sq', 'R Value', 'Residual Sum of Squares', 'Pearson's r', 'R-Square(COD)', 'Adj. R-Square', 'RootMSE (SD)', and 'Norm of Residuals'. The 'Reduced Chi-Sq' and 'Adj. R-Square' checkboxes are checked. The 'Fit Statistics' section is also expanded, showing 'Number of Points' (checked), 'Degrees of Freedom' (checked), 'Reduced Chi-Sq' (checked), 'R Value' (checked), 'Residual Sum of Squares' (checked), 'Pearson's r' (checked), 'R-Square(COD)' (checked), 'Adj. R-Square' (checked), 'RootMSE (SD)' (checked), and 'Norm of Residuals' (checked).

Linear Fit

Dialog Theme: [Dropdown]

Description: Fit as 1/Weight: Instrumental

Fit Options

- Fix Intercept: [Input]
- Fix Intercept at: [Input]
- Fix Slope: [Input]
- Fix Slope at: [Input]
- Use Reduced Chi-Sq:
- Apportion Fit:

Quantities to Compute

- Fit Parameters
 - Value:
 - Standard Error:
 - LCL:
 - UCL:
 - Confidence Level for Parameters(%): [Input]
 - NValue:
 - ProbN:
 - CI Half-Width:
- Fit Statistics
 - Number of Points:
 - Degrees of Freedom:
 - Reduced Chi-Sq:
 - R Value:
 - Residual Sum of Squares:
 - Pearson's r:
 - R-Square(COD):
 - Adj. R-Square:
 - RootMSE (SD):
 - Norm of Residuals:

OK Cancel

Cuadrados mínimos @Origin 8.5:

OriginPro 8.5.1 - C:\Users\publico\LABORATORIOS\Desktop\tuto - Folder1 - [Book1]

File Edit View Plot Column Worksheet Analysis Statistics Image Tools Format Window Help

100%

Default A - 0

tuto

Folder1

Linear Fit (06/05/2017 11:50:17)

Notes

- Input Data
- Masked Data - Values Excluded from Computations
- Bad Data (missing values) - Values that are invalid and thus not used in computations

Parameters

	Value	Standard Error
B Intercept	0.58741364	0.348558418
B Slope	1.0171213564	0.0108449035

Statistics

	B
Number of Points	41
Degrees of Freedom	39
Reduced Chi-Sq	1.8074910178
Residual Sum of Squares	70.4921496956
Pearson's r	0.997904735
Adj. R-Square	0.9954726451

Summary

	Intercept	Slope	Statistics		
	Value	Standard Error	Value	Standard Error	Adj. R-Square
B	0.58741364	0.348558418	1.0171213564	0.0108449035	0.9954726451

ANOVA

	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
Model	1	15899.0182227042	15899.0182227042	8795.1810409096	0
B Error	39	70.4921496956	1.8074910178		
Total	40	15969.5103723998			

Fitted Curves Plot

Residual vs. Independent Plot

Sheet1 | FitLinear1 | FitLinearCuvet1

Saving project tuto to D:\Alumnos\OriginLab\851\Autosave\tuto-9237942.apj...

The Origin Forum... NOTAS - Labo 1 ... OriginPro 8.5.1 ... 2.png - Paint

AU: ON

[Book1] | FitLinear1

Referencias

Baird, D. C. (1962). Experimentation: an introduction to measurement theory and experiment design. Prentice Hall.

Fornasini, P. (2008). The uncertainty in physical measurements: an introduction to data analysis in the physics laboratory. Springer Science and Business Media.

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. (1982). Numerical recipes in C (Vol. 2). Cambridge: Cambridge university press.