

Práctica 5: Mínimos cuadrados

1. Determinar la recta que mejor aproxima, en el sentido de cuadrados mínimos, los siguientes conjuntos de datos

(a)

x	1	-2	3	4
y	4	5	-1	1

(b)

x	-1	0	1	2
y	1	1	0.5	4

2. Implementar una función que reciba como input x_list e y_list (dos listas de datos) y devuelva la recta de regresión lineal.
3. Implementar función a la que reciba una tabla de datos y nos devuelva el R^2 de aproximar esa lista por cuadrados mínimos.
4. Supongamos que se deja caer un objeto desde una altura de 200 m. Mientras cae, se toman las siguientes mediciones:

tiempo	0	1	2	4	6
altura	200	195	180	120	25

Sabemos que la altura de dicho objeto, después de haber transcurrido un tiempo t , viene dada por $f(t) = 200 - \frac{1}{2}gt^2$. Hallar la parábola que mejor aproxima en el sentido de cuadrados mínimos. Con dicha parábola, determinar el valor aproximado de g .

5. Implementar un programa que reciba como input x_list , y_list (dos listas de datos) y $n \in \mathbb{N}$ y devuelva el polinomio de grado n que mejor ajusta en el sentido de mínimos cuadrados.
6. Desde 1981 hasta 1984 se estimó una población de conejos en una gran isla y se obtuvieron los datos

año	1981	1982	1983	1984
N	2960	4540	8080	17060

Se espera que los datos se ajusten a una función exponencial de la forma $N(t) = N_0 e^{K(t-1981)}$

- (a) Usar el método de mínimos cuadrados para hacer este ajuste.

- (b) Determinar la población aproximada en 1985.
7. Implementar una función que reciba una tabla de datos y una función h (la transformación que le hacemos a *ylst* al linnealizar el problema), y nos devuelva la recta que mejor se ajuste en el sentido de cuadrados mínimos generalizados.
8. En cierta especie animal se estudia la relación entre el peso X (en kgs) y el volumen pulmonar Y (en litros), obteniéndose los datos

peso (kgs)	60	85	100	150	250
vol. pulmonar (l)	2.3	4	5	9	19.5

- (a) Ajustar los datos a una función $Y = aX^b$ en el sentido de cuadrados mínimos. Calcular el R^2 correspondiente.
- (b) determinar el valor de R^2 , qué puede decir al respecto?.
- (b) Ajustar los datos a una función $Y = aX^b$ en el sentido de cuadrados mínimos generalizados. Calcular el R^2 correspondiente y comparar con el calculado en el ítem anterior.
- (c) Graficar ambos ajustes y comparar.
9. Con una preparación enzimática constituida por dos isoenzimas se realizó el siguiente estudio: tomando 4 puntos experimentales, en el margen de concentraciones de 0.05 a 50mM, espaciados logarítmicamente y realizándose 5 réplicas por punto (20 datos en total). Las rélicas han servido para la obtención de las desviaciones estándar correspondientes (s_i) y nos van a permitir realizar una regresión no lineal con pesos estadísticos ($w_i = 1/s_i^2$, siendo s_i la desviación estandar). Los resultados fueron

caso/variable	[S](mM)	v ($\mu\text{mol}/(\text{Lmin})$)	Desviación estandar
réplica 1	0.05	0.052947	$6.3809 \cdot 10^{-4}$
réplica 2	0.05	0.053088	$6.3809 \cdot 10^{-4}$
réplica 3	0.05	0.052257	$6.3809 \cdot 10^{-4}$
réplica 4	0.05	0.052189	$6.3809 \cdot 10^{-4}$
réplica 5	0.05	0.051510	$6.3809 \cdot 10^{-4}$
réplica 1	0.13410	0.12777	$3.1641 \cdot 10^{-3}$
réplica 2	0.13410	0.12964	$3.1641 \cdot 10^{-3}$
réplica 3	0.13410	0.13319	$3.1641 \cdot 10^{-3}$
réplica 4	0.13410	0.13419	$3.1641 \cdot 10^{-3}$
réplica 5	0.13410	0.13522	$3.1641 \cdot 10^{-3}$
réplica 1	0.5980	0.29858	$6.9915 \cdot 10^{-3}$
réplica 2	0.5980	0.30526	$6.9915 \cdot 10^{-3}$
réplica 3	0.5980	0.28721	$6.9915 \cdot 10^{-3}$
réplica 4	0.5980	0.29436	$6.9915 \cdot 10^{-3}$
réplica 5	0.5980	0.30179	$6.9915 \cdot 10^{-3}$
réplica 1	0.96530	0.59586	$2.0035 \cdot 10^{-2}$
réplica 2	0.96530	0.57123	$2.0035 \cdot 10^{-2}$
réplica 3	0.96530	0.57756	$2.0035 \cdot 10^{-2}$
réplica 4	0.96530	0.62248	$2.0035 \cdot 10^{-2}$
réplica 5	0.96530	0.58658	$2.0035 \cdot 10^{-2}$

se trata de decidir si las dos isoenzimas de la mezcla tienen el mismo comportamiento cinético (la misma V_{max} y K_m) o distinto comportamiento (diferentes V_{max} y K_m).

La cinética de reacciones catalizadas por varios isoenzimas que actúan sobre un mismo sustrato, se interpretan en muchos casos como la suma de ecuaciones de Michaelis-Menten

$$v = \sum_{i=1}^n \frac{V_{max}^i [S]}{K_m^i + [S]}$$

Por medio de cuadrados mínimos generalizados:

- Ajustar los datos con una ecuación de Michaelis-Menten de un solo sumando (lo que significaría que las 2 isoenzimas tienen el mismo comportamiento cinético).
 - Calcular el R^2
 - Graficar y decidir si las dos isoenzimas tienen la misma cinética. Es decir, considera que alcanza con determinar un par de valores V_{max} y K_m ? o probaría con ajustar al modelo a grado 2 ($n=2$), lo que significaría que las 2 isoenzimas tienen distinto comportamiento cinético y en ese caso sería necesario determinar dos pares distintos de V_{max} y K_m .
10. Implementar una función que reciba como input x_{list} e y_{list} (dos listas de datos), una lista de funciones, devuelva la recta que mejor se ajuste en el sentido de cuadrados mínimos a la suma de las funciones.

11. Se sabe que la siguiente tabla de datos corresponde con una muestra que verifica una relación de la forma $ax + 3y + bz = 0$. Plantear un modelo conveniente que permita determinar los valores de $a, b \in \mathbb{R}$ por el método de cuadrados mínimos

x	-2	0	0.5	1
y	1	0.9	0.1	-1
z	1	0	0.5	1