

# Informe Tarea 1 - Métodos Numéricos

Bruno Quezada

8 de diciembre

**Asignatura:** Métodos Numéricos - FI 3104-1  
**Profesor Cátedra:** Valentino González  
**Auxiliares:** José Vines, Jou-Hui Ho

# 1. Pregunta 1

## 1.1. Introducción

En este problema se quiere estudiar la correlación entre las reservas de uranio enriquecido y los Ph.D. en matemáticas en EE.UU. Con los datos entregados se ajustan distintas curvas de interpolación de los datos y se responden las preguntas de enunciado. El procedimiento para responder cada pregunta es detallado en la siguiente sección.

En las Figura 1 y 2 se presentan las series anuales de los datos y su relación, respectivamente.

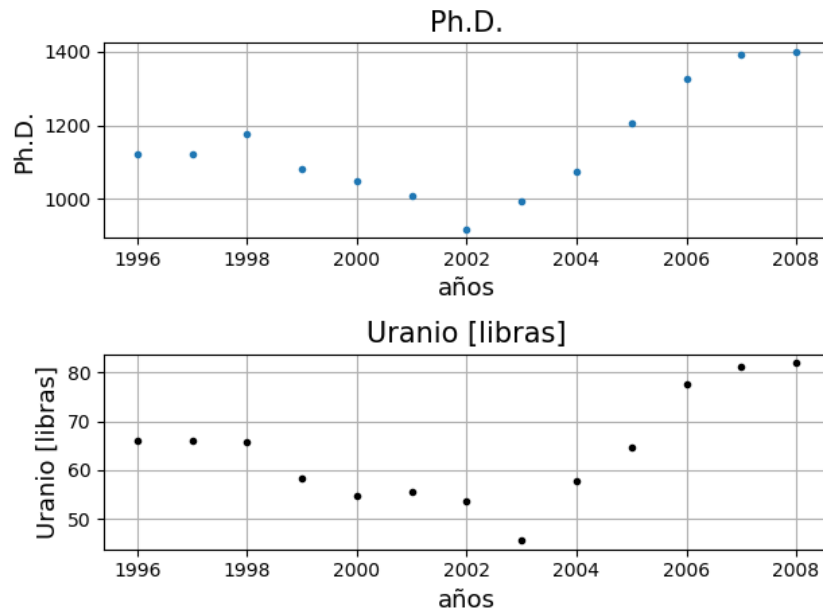


Figura 1: Series anuales de Uranio y Ph.D.

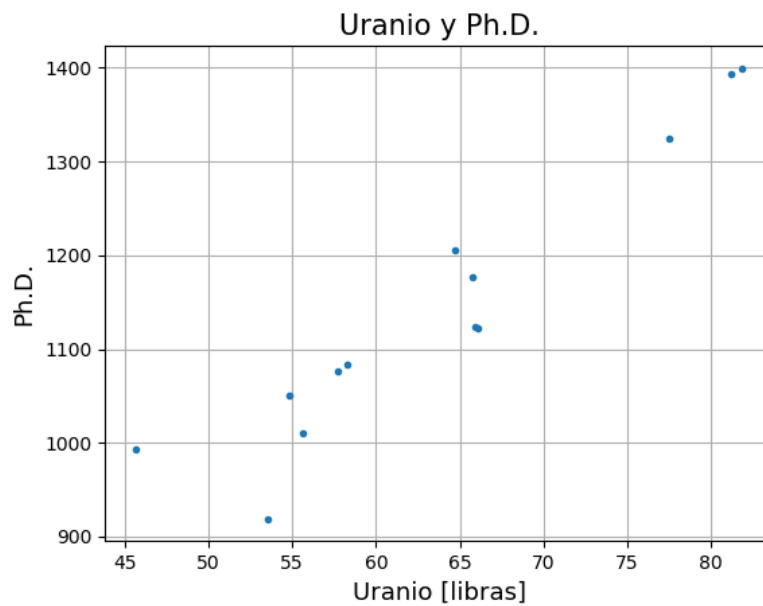


Figura 2: Relación entre Uranio y Ph.D.

## 1.2. Preguntas

### Pregunta a: ¿Por qué es mala idea fitear un polinomio de orden 12?

Es mala idea utilizar un polinomio de grado 12 para fitear los datos ya que, por lo general, al implementar esta clase de soluciones el polinomio resultante no es una función suave, por lo que alcanza valores muy altos entre los datos.

Como lo que se quiere es estudiar el comportamiento y relación entre ambos parámetros, es mejor utilizar polinomios más suaves de menor grado que permiten hacer interpolaciones y extrapolaciones más razonables.

### Pregunta b: ¿Cuanto deberán bajar las reservas de Uranio para que nadie tenga un doctorado en matemáticas? ajuste de polinomio $P(U)$ de orden 1

Para responder esta pregunta se decide optimizar el error cuadrático al ajuste.

$$\text{Min} ||y_{obs} - x_{obs} \cdot m - n||_2^2 \quad (\text{Función de Mérito})$$

Donde al resolver en forma general se obtiene:

$$m = \frac{SS_{xy} \cdot S_x S_y}{SS_{xx} - S_x^2}$$

$$n = \frac{S_x S_{xy} - S_{xx} S_y}{S_x^2 - SS_{xx}}$$

Donde  $S = 13$ ,  $S_x = \sum x_i$ ,  $S_y = \sum y_i$ ,  $S_{xx} = \sum x_i^2$ ,  $S_{xy} = \sum x_i y_i$ .

Entonces en este caso el Uranio es la variable independiente y los doctorados la independiente, el ajuste queda de la forma  $P(U) = m \cdot Ph.D. + n$ . El ajuste de los mínimos cuadrados se presenta en la Figura 3.

Las reservas de Uranio debiesen ser de -24.7 libras para que no existan Ph.D. según el modelo con un  $\chi^2 = 2311$

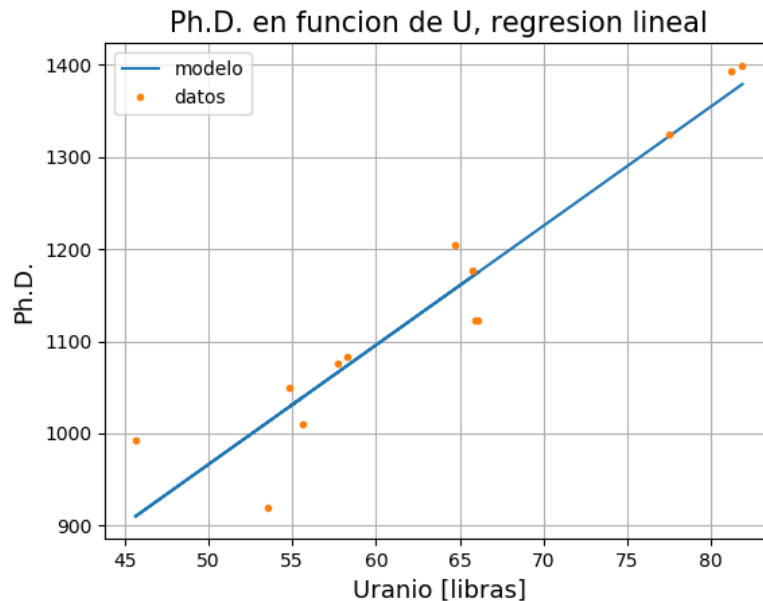


Figura 3: Ajuste de polinomio de orden 1 con Uranio como variable independiente

### Pregunta c: ¿Cuántos Ph.D. debiesen graduarse para que las reservas de Uranio bajen a 0 ? ajuste de polinomio $P(Ph.D.)$ de orden 1

Para este caso se repite la metodología anterior de minimización del error cuadrático. En este caso la variable independiente son los Ph.D. y la variable dependiente es la reserva de Uranio. El ajuste se encuentra en la Figura 4.

Se deberían graduar 235 Ph.D, Para que las reservas bajen a 0, según el modelo, con un error de ajuste de  $\chi^2 = 4083$

### Pregunta d: ¿Por qué no son equivalentes los modelos?

En la Figura 5, se puede apreciar que los modelos no son idénticos. La diferencia se debe a que el error cuadrático, por definición, considera la distancia vertical entre el modelo y las observaciones ( $y_{obs} - f(\vec{x})$ ) como

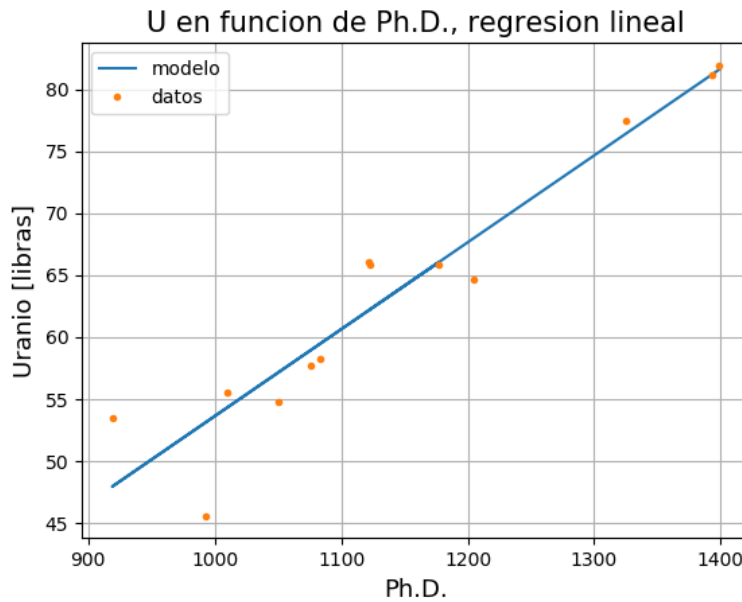


Figura 4: Ajuste de polinomio de orden 1 con Ph.D. como variable independiente

parámetro a minimizar. Por lo tanto, al intercambiar la variable dependiente con la independiente se están minimizando distintas distancias. Por ello, es natural que hayan distintos modelos dependiendo de cual variable es considerada la independiente. En este caso, las reservas de Uranio debiesen bajar a -16.47 para que no hayan doctorados y debiesen graduarse 319 doctorados para que las reservas de uranio descendan a 0

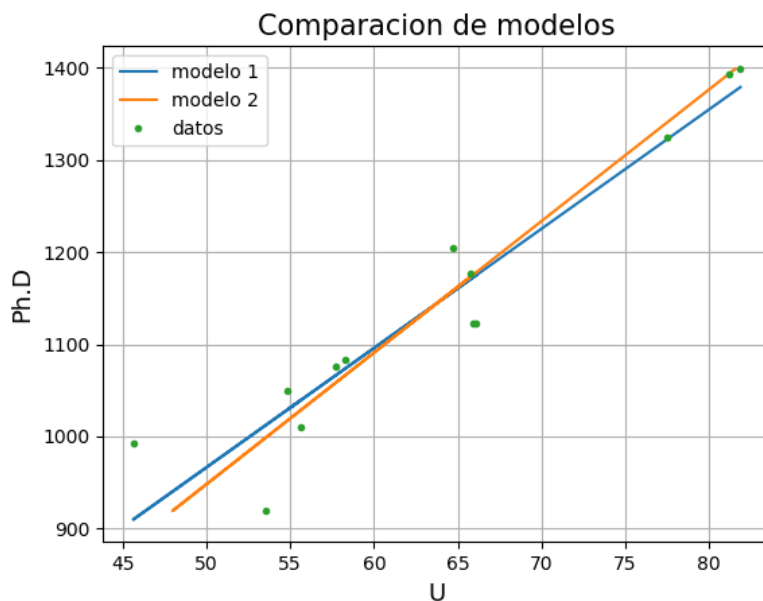


Figura 5: Comparación de ambos modelos. Se aprecia que no son iguales.

### Pregunta e: Utilizando polinomios de orden mayor

Se ajustan polinomios de orden 5 (Figura 6) y de orden 6 (Figura 7). Para obtenerlos se utiliza la función *curve\_fit()* la cual busca minimizar el error.

Se puede observar que ambos modelos son cualitativamente muy parecidos. Para los casos en que la variable independiente son los Ph.D. el ajuste es muy malo, a diferencia de cuando la variable independiente es el Uranio. Esto puede deberse a que el algoritmo encontró un mínimo local y no uno global.

De todos modos los recorridos de estas funciones se alejan totalmente al esperado en torno al cero, por lo que no tiene sentido responder las preguntas I y II en este caso.

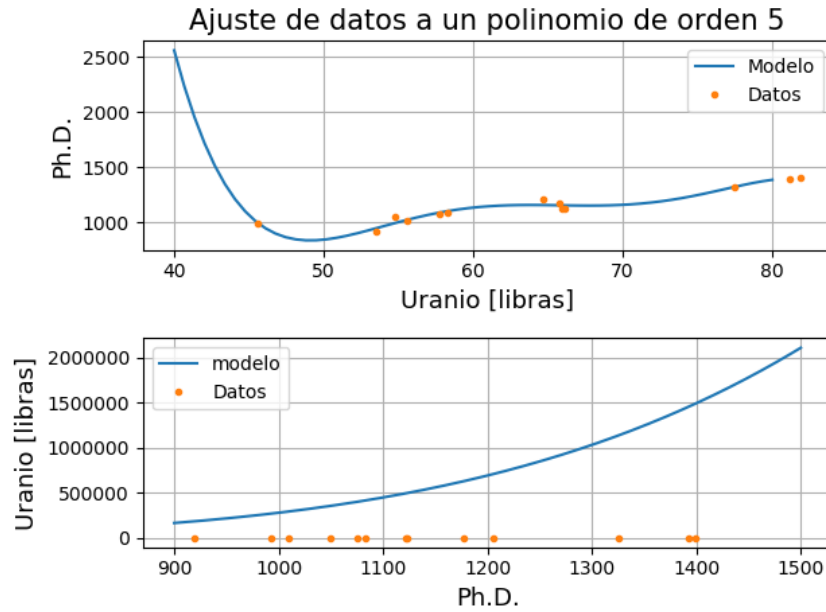


Figura 6: Ajuste de polinomio de orden 5 a los datos

### 1.3. Comentarios y Conclusiones

En esta pregunta se aprecia que los algoritmos de ajustes de curva son susceptibles a mínimos locales, ya que utilizan el algoritmo de Levenberg Marquardt, el cual utiliza propiedades de las derivadas de las funciones para encontrar mínimos.

Sucede un fenómeno interesante contra intuitivo para los ajustes de polinomios de orden mayor. A pesar de que el ajuste posee más grados de libertad para "explicar" los datos y, por lo tanto, un menor error de ajuste, las curvas resultantes no tienen sentido al alejarse de los bordes de los datos observados.

Por ello, es necesario considerar cuidadosamente la cantidad de parámetros que se utilizan para realizar ajustes de curvas. También considerar que el un error de ajuste menor para los modelos no significa una mejor curva. En el caso extremo está el polinomio de Lagrange el cual tiene error de ajuste 0 y es una pésima forma de encontrar relaciones entre parámetros.

## 2. Pregunta 2

### 2.1. Introducción

En esta pregunta se busca encontrar el modelo que mejor estime los parámetros de una curva de radiación en función de la longitud de onda (Figura 8). Para ello se considerará que la curva está compuesta de una recta y una campana de Gauss.

### 2.2. Procedimiento

Para encontrar los mejores parámetros que ajusten los datos se implementa la función  $\text{modelo}(x, m, n, \sigma, \mu, A)$  la cual consiste en la suma de una gaussiana de promedio  $\mu$ , desviación  $\sigma$  y amplitud  $A$  y una recta de pendiente  $m$  y coeficiente de posición  $n$ , evaluados en un punto  $x$ . Luego, se implementa la función  $\text{residual}(\text{parámetros}, X_{\text{obs}}, Y_{\text{obs}})$ , la cual calcula la diferencia entre el modelo (gaussiana + recta) dado un conjunto de parámetros y las observaciones.

Por último, con estas funciones definidas se utiliza función  $\text{minimize}()$  del paquete *lmfit* para encontrar los parámetros óptimos. Para utilizar  $\text{minimize}()$  es necesario entregar unos parámetros iniciales, los cuales se definieron analizando la figura 8. En particular, la pendiente  $m$  se estimó como la pendiente entre el primer y último dato del espectro, el coeficiente de posición se despejó utilizando la pendiente estimada y un punto del gráfico con la ecuación de la recta  $y = mx + n$ , la amplitud se estimó como la resta entre el máximo y el mínimo valor del vector de radiación,  $\mu$  se estimó como la longitud de onda que poseía el mayor valor de radiación, y  $\sigma$  con una inspección del ancho de la curva gaussiana.

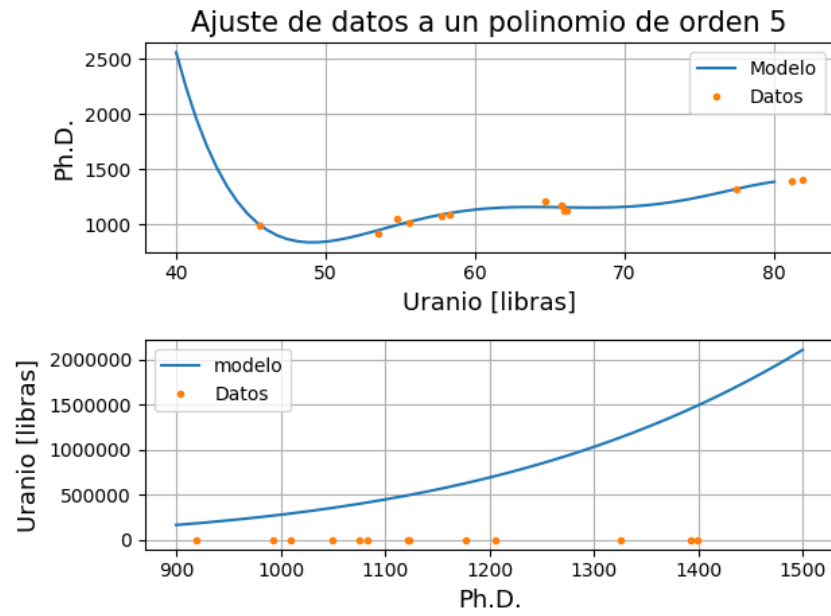


Figura 7: Ajuste de polinomio de orden 6 a los datos

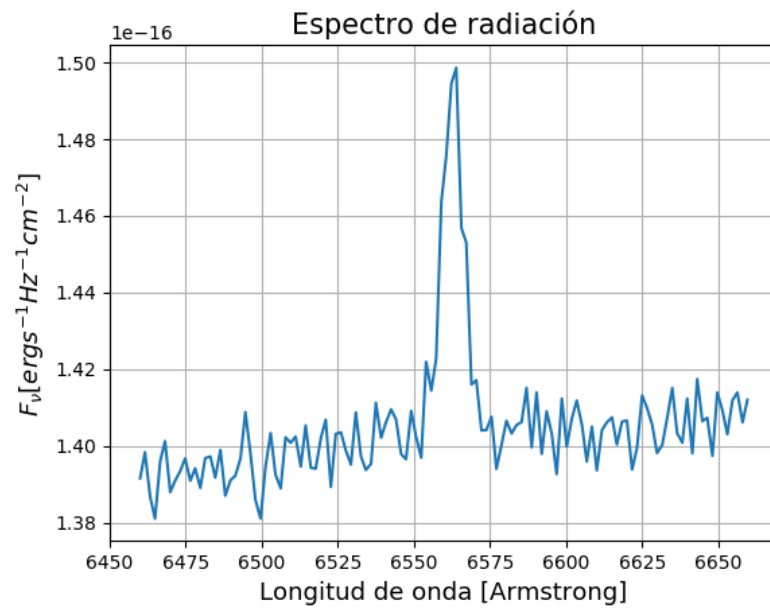


Figura 8: Radiación en función de la longitud de onda

### 2.3. Resultados

En el cuadro 1 se presentan los valores de los parámetros óptimos estimados por el algoritmo de Levenberg Marquardt. En la figura 9 se presentan el modelo con los parámetros iniciales y el modelo con los parámetros óptimos.

Parámetro	Valor	Intervalo de confianza
<b>A</b>	$9,41 \cdot 10^{-18}$	$\pm 0,41 \cdot 10^{-18}$
$\sigma$	3,61	$\pm 0,18$
$\mu$	6562,7	$\pm 0,17$
<b>m</b>	$7,95 \cdot 10^{-21}$	$\pm 1,01 \cdot 10^{-21}$
<b>n</b>	$8,79 \cdot 10^{-17}$	$\pm 0,661 \cdot 10^{-18}$
$\chi^2_{red}$		$9,77 \cdot 10^{-36}$

Cuadro 1: Parámetros óptimos del ajuste, obtenidos a través de L-M

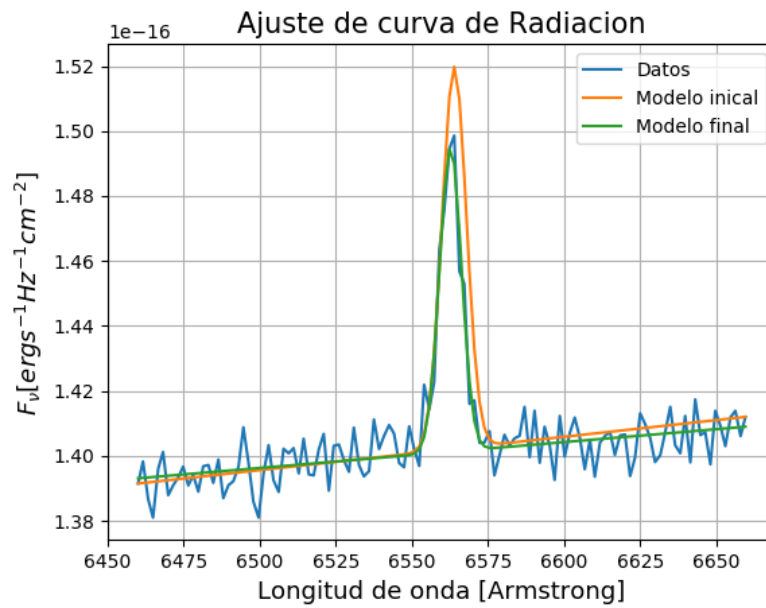


Figura 9: Modelos de ajuste a la radiación

### 2.4. Análisis y Conclusiones

Se considera que la función encontró los parámetros óptimos ya que es evidente en la figura 9 que hay una buena bondad de ajuste. En la zona fuera de la gaussiana, la función presenta oscilaciones que no pueden ser representadas por nuestro modelo, esto sería fácil de corregir si es que a la función lineal se la multiplicara por una función sinusoidal, lo que agregaría 3 parámetros más al modelo: amplitud, frecuencia y fase de la sinusoidal.

Para estos algoritmos, que buscan mínimos de funciones no lineales (en este caso minimizamos el error de ajuste) utilizando propiedades del gradiente, es importante tener un vector de parámetros inicial cerca del mínimo global, para evitar que el estimador llegue a un mínimo local.

En este caso es posible estimar fácilmente si los parámetros encontrados ajustan bien, ya que se pueden graficar los resultados. Para el caso que se tengan muchos parámetros a ajustar, esto no será posible y será necesario estimar por alguna otra forma si el algoritmo está en el mínimo global. En particular, se puede realizar muchas veces la minimización entregando distintos puntos de partida al algoritmo para explorar de mejor manera el espacio de las soluciones.

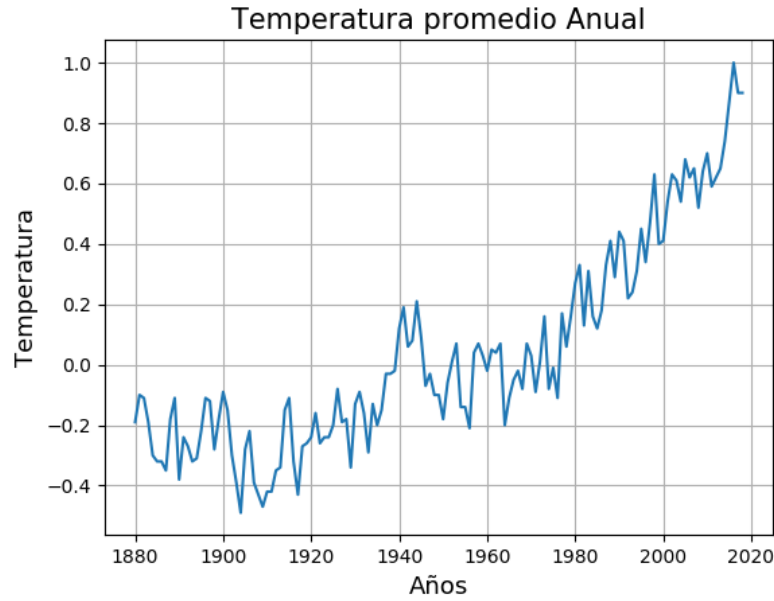


Figura 10: Temperatura promedio anual histórica

### 3. Pregunta 3

#### 3.1. Introducción

En esta pregunta se solicita ajustar una curva que permita extrapolar los valores de temperatura media planetaria hasta encontrar el año en que se alcance una anomalía de 2 grados Celsius en comparación con el período pre-industrial.

Los datos con que se hará el modelo se presentan en la figura 10

#### 3.2. Procedimiento

Por inspección de la figura 10, se observa que el registro tiene una fuerte tendencia al crecimiento y una componente oscilatoria, por ello se intentará ajustar una parábola multiplicada por una función seno por lo que el modelo queda:

$$T(t) = at^2 + bt + A \cdot \text{seno}(\omega t) \quad (1)$$

luego al igual que el caso de la pregunta 2, se define la residual y se encuentran los mejores parámetros con el algoritmo de Levenberg Marquardt.

Antes de realizar el modelo, se limpian los datos que posean valores nan utilizando el promedio de los datos adyacentes para rellenar. En el caso de valores con nan en el final, se repite el valor anterior.

Para estimar el intervalo de confianza, se crean las curvas más y menos conservadoras utilizando los intervalos de confianza entregados por el algoritmo. En este caso se utilizan el coeficiente  $b = b \pm \Delta b$  y  $a = a \pm \Delta a$ . Los parámetros de la sinusoidal se dejan iguales ya que no afectan significativamente el resultado y la constante  $c$  se ajusta para que los límites de confianza coincidan con la temperatura en el año 2018.

#### 3.3. Resultados

en la figura 11, se presenta el modelo con el mejor ajuste. Donde se puede observar que en el año 2069 se alcanzaría una anomalía de temperatura de 2 grados.

El intervalo de confianza se presenta en la figura 12, en donde se observa una gran diferencia entre los modelos. Para el peor caso, la tragedia ocurriría en el año 2034 y en el caso más optimista la temperatura promedio desciende a lo largo del tiempo.

#### 3.4. Análisis y Conclusiones

Se considera que el modelo óptimo ajusta bastante bien la tendencia de la temperatura a aumentar, en cambio, la parte oscilatoria no logra capturar bien el fenómeno. Esto último se puede deber a que las oscilaciones anuales son un proceso más complejo y que requeriría de más parámetros para ser mejor representado.



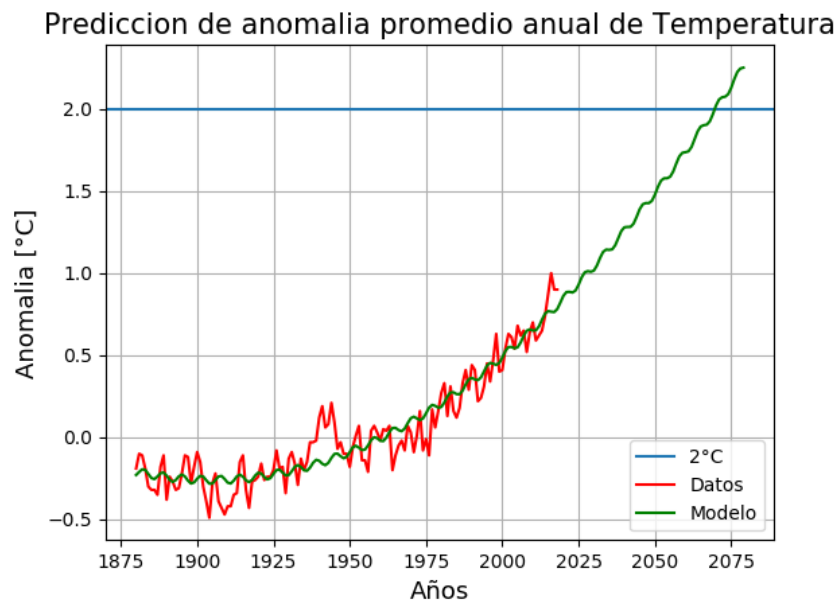


Figura 11: Ajuste de temperatura como una parábola multiplicada por un seno

Con respecto a los intervalos de confianza, presentan una gran ventana que crece a medida que se avanza en el tiempo.

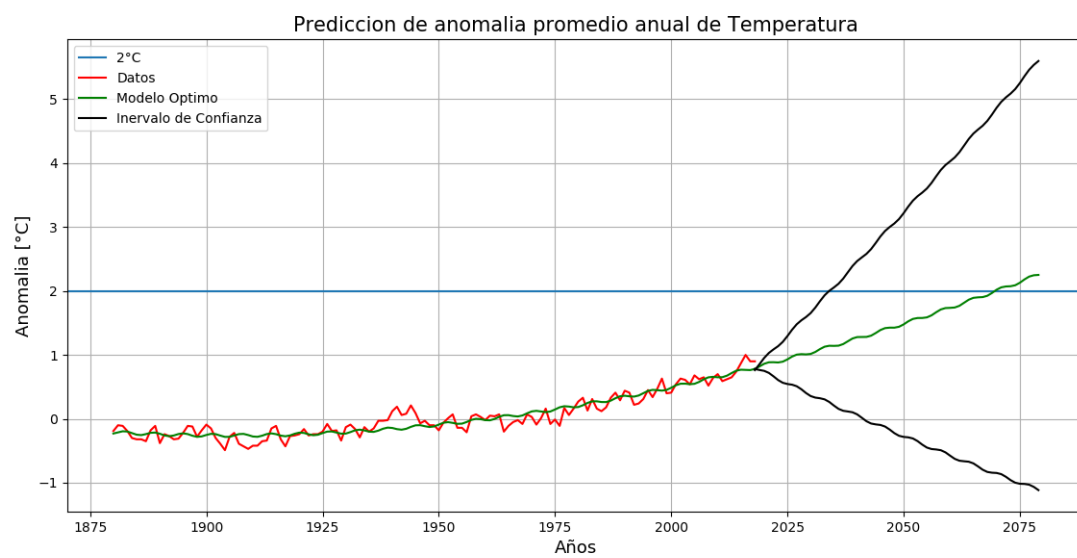


Figura 12: Intervalos de confianza para el modelo estimado de temperatura