optimizacion

October 26, 2015

1 Ajuste de funciones lineales y no lineales

Prof: Felipe Gómez
26-oct-2015

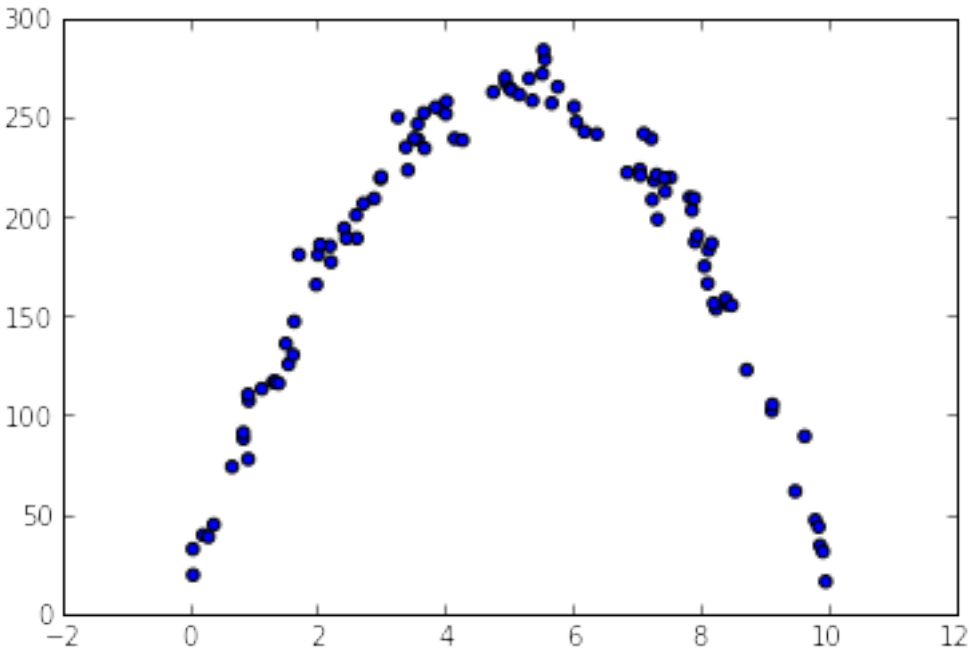
2 Ajuste Polinomial

Tenemos una serie de datos experimentales x,y (con ruido) obtenidos de un lanzamiento parabólico:

In [1]:
```
%pylab inline

a = 10
b = +100
c = -9.8

x     = np.random.uniform(0.,10,100)
ruido = np.random.normal(0.0,10,100)
y     = a + b*x + c*x**2 + ruido

scatter(x,y)
```

```
Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib
```

Out[1]:
```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x3ded8d0>
```



Y queremos ajustarlos a una función polinomial de segundo grado de la forma:

$$f(x) = a + bx + cx^2$$

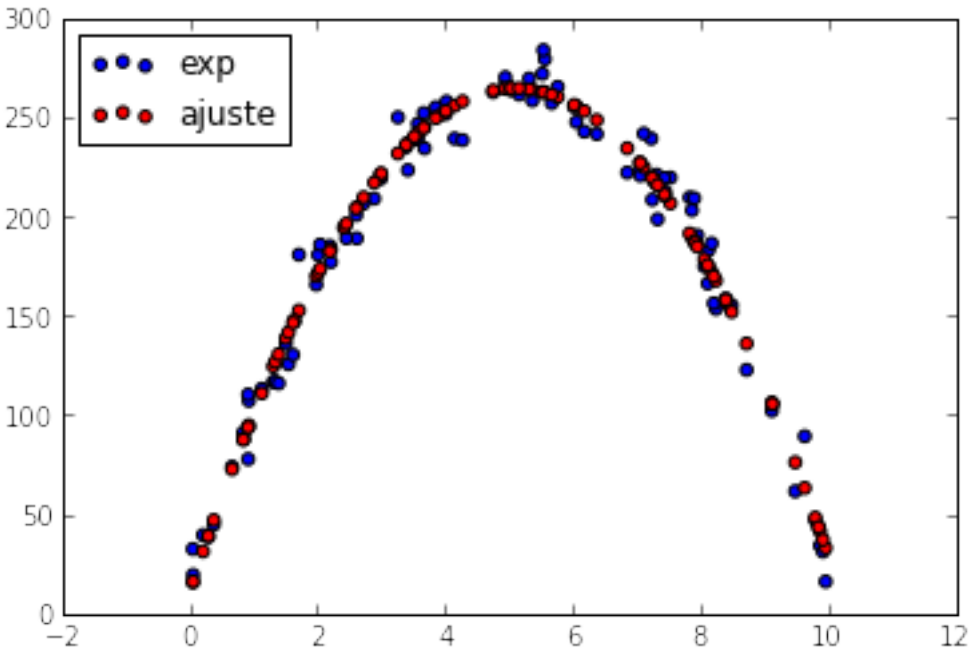
```
In [2]: def cuadratica(x,a,b,c):
            return a + b*x + c*x**2
```

Importaremos el módulo curve_fit de scipy y hacemos el ajuste de nuestra función a los datos experimentales

```
In [3]: from scipy.optimize import curve_fit

        curve_fit( cuadratica, x, y)

Out[3]: (array([ 10.92437913,  99.49149336,  -9.76630755]),
         array([[ 9.75652054, -3.99163504,  0.33623885],
                [-3.99163504,  2.18320915, -0.20624595],
                [ 0.33623885, -0.20624595,  0.02072823]]))
```

Este método nos devuelve dos listas, una con los parámetros que dan el ajuste óptimo (popt) y otra lista con la matriz de covarianza de los parámetros (pcov)

```
In [4]: popt, pcov = curve_fit( cuadratica, x, y )

In [5]: y_opt = cuadratica( x, popt[0], popt[1], popt[2] )

        scatter(x, y, label="exp")
        scatter(x, y_opt, c="r", label="ajuste")
        legend(loc=2)

Out[5]: <matplotlib.legend.Legend at 0x43a0b10>
```



3 ¿Qué estamos optimizando?

Podemos comparar los valores experimentales "y" con los valores encontrados con nuestro ajuste "y_opt"

```
In [6]: print "y[0]    =", y[0]
        print "y_opt[0]=", y_opt[0]

        print "Diferencia=", y[0] - y_opt[0]

y[0]    = 34.2796986662
y_opt[0]= 41.3717538805
Diferencia= -7.09205521438

In [7]: ( y[0] - y_opt[0] )**2

Out[7]: 50.297247163859552
```

Definimos χ^2 (chi cuadrado) como la suma de la diferencia al cuadrado entre los valores observados y los estimados:

$$\chi^2 = \sum_{n=0}^{N} \left(y_n^{\text{obs}} - y_n^{\text{fit}} \right)^2$$

Y es justamente χ^2 lo que queremos minimizar usando el método scipy.optimize.curve_fit.
Cuando calculamos χ^2 con los parámetros óptimos tenemos:

```
In [8]: chi_sqr = sum( ( y - y_opt )**2 )

        print chi_sqr
```

```
10840.6541145
```

Probemos ahora cuál sería χ^2 con parámetros que están lejos de los parámetros óptimos:

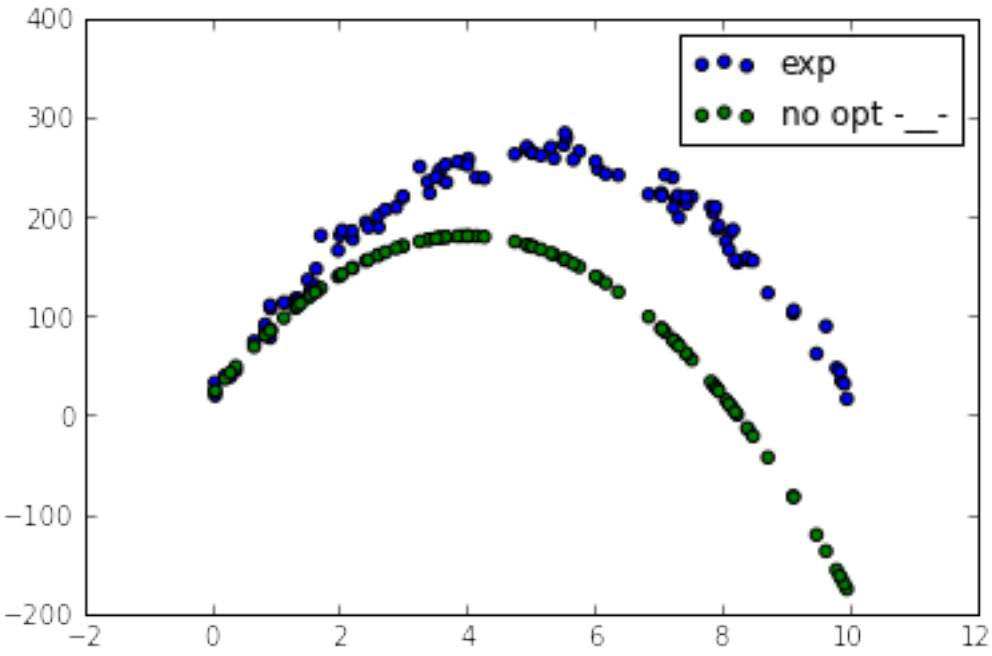
```
In [9]: y_guess = cuadratica(x, 20, 80, -10)
        print sum( ( y - y_guess )**2 )
```

```
1313394.12629
```

Con esto:
$\chi^2_{\text{optimo}} \sim 10^5$ --
y
$\chi^2_{\text{guess}} \sim 10^7$ -_-

```
In [10]: scatter(x,y, label="exp")
         scatter(x,y_guess, label="no opt -__-", c="g")
         legend(loc=0)
```

```
Out[10]: <matplotlib.legend.Legend at 0x43c80d0>
```



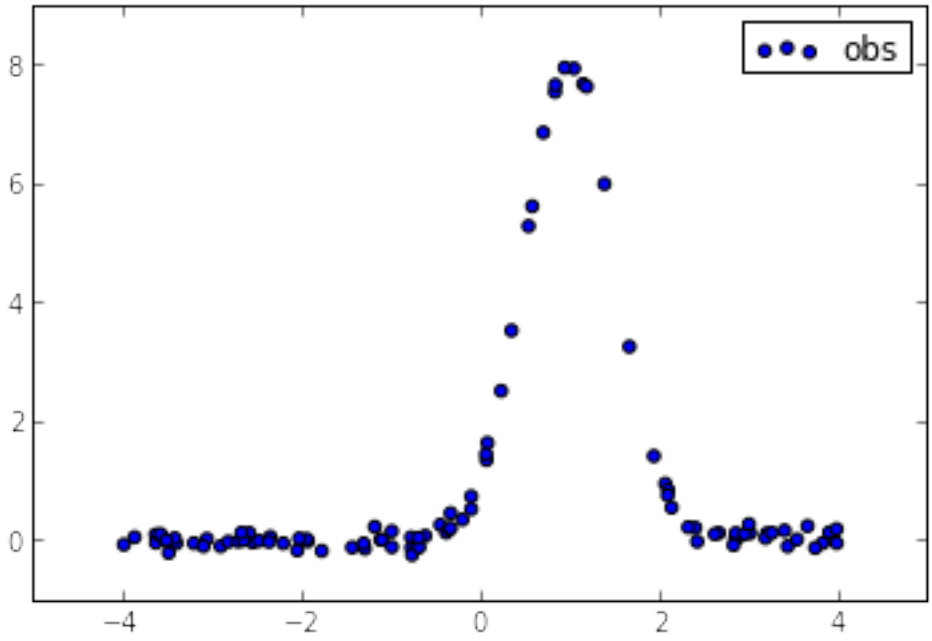
4 Ajuste de una función No Lineal

```
In [11]: def gaussiana(x, ampl, x_0, sigma):
             return ampl*exp( -(x-x_0)**2/sigma )
```

Tenemos ahora unos datos observados (con ruido) que se ajustan a una gaussiana con una amplitud de $A = 8.0$, centrada en $x_0 = 1.0$, con un ancho $\sigma = 0.5$.

```
In [12]: x     = np.random.uniform(-4,4, 100)
         noise = np.random.normal(0., 0.1, 100)
         y     =  gaussiana( x, 8.0, 1.0, 0.5 ) + noise

         scatter(x,y, label="obs")
         legend(loc=0)
```

```
Out[12]: <matplotlib.legend.Legend at 0x445c350>
```

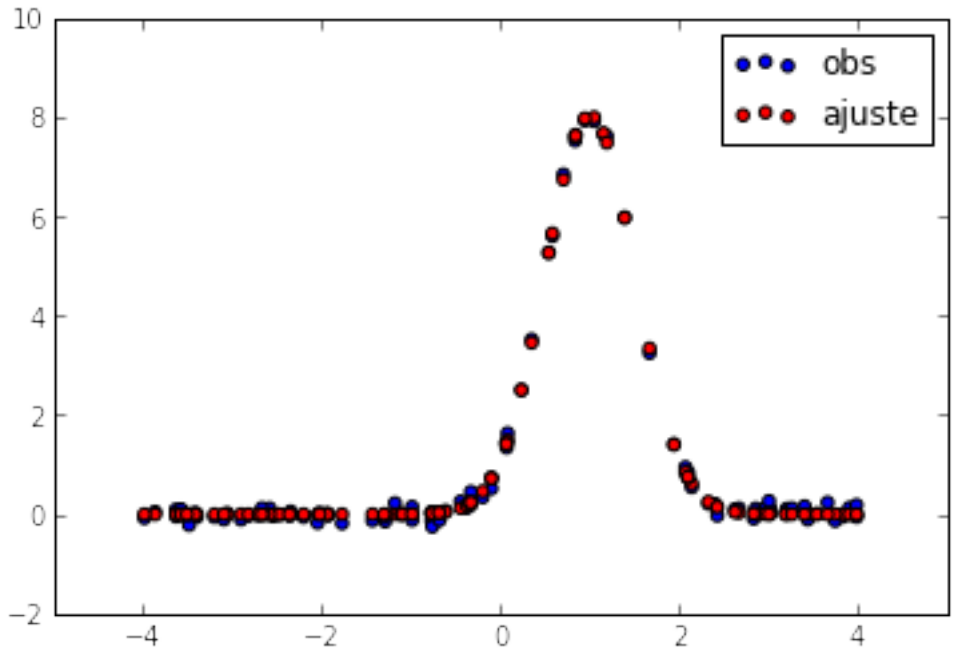



```
In [13]: p_opt, p_cov = curve_fit( gaussiana, x, y)

In [14]: p_opt

Out[14]: array([ 8.01857215,  1.00445725,  0.50615839])
```

Los parámetros de mejor ajuste encontrados son $A = 8.018$, $x_0 = 1.004$, y $\sigma = 0.506$

--

```
In [15]: y_opt = gaussiana(x, p_opt[0], p_opt[1], p_opt[2])

         scatter(x,y, label="obs")
         scatter(x,y_opt, c="r", label="ajuste")
         legend(loc=0)

Out[15]: <matplotlib.legend.Legend at 0x47a8fd0>
```



5 Referencias:

Curso de Python para Físicos del Max Planck Institute for Astrophysics
http://www2.mpia-hd.mpg.de/~robitaille/PY4SCI_SS_2014/_static/15.%20Fitting%20models%20to%20data.html
Documentación oficial de scipy.optimize.curve_fit
http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.optimize.curve_fit.html#scipy.optimize.curve_fit