TRABAJO PRÁCTICO N°2
Interpolación y Ajuste

Introducción

Estos dos términos, interpolación y ajuste, muchas veces se confunden. Principalmente, porque se los utiliza en el mismo contexto, que resulta ser nuestro deseo de generalizar un conjunto de información relativamente escaso como puede ser el dado por una nube de puntos, al continuo. O bien, al tratar de predecir el comportamiento de un sistema más allá de lo que de él se conoce. Para evitar esta confusión, vamos a definir ambos términos:

- **Interpolación**: Función que *necesariamente* pasa por los puntos dato.
- **Ajuste**: Función que no *necesariamente* pasa por todos los puntos dato, pero que intenta *minimizar la distancia de los datos a la función.*

Dado que ambas funciones, la de interpolación y la de ajuste, son continuas, permite "predecir" valores de la variable en estudio para el espacio entre los datos, o bien fuera del conjunto de datos (extrapolar). Esto debe hacerse con extremo cuidado, ya que una interpolación o un ajuste incorrectos puede "rellenar" los huecos presentes en la información disponible que no representan en absoluto la naturaleza del sistema en estudio. Por ejemplo, si se intenta interpolar la velocidad de un vehículo en proceso de frenado, en llano y sin viento a favor, las velocidades tienen que ser monótonamente decrecientes: si una interpolación ofrece valores crecientes de la velocidad en algún intervalo, entonces la interpolación no representa la *naturaleza física* del sistema; sus predicciones son completamente inútiles. En este punto es clave la *intuición* del ingeniero, que de intuición tiene poco. Más que intuición, es *conocimiento acabado de lo que se estudia.*

Interpolación: Polinomio interpolante

El *polinomio interpolante* es una función polinómica (un polinomio, bah) **que pasa por todos los puntos dato**. Tiene la característica de ser el polinomio de menor grado que puede pasar por todos los puntos dato. Existen varios métodos para obtener este polinomio.

Matriz de Vandermonde

Este es el método más intuitivo de los que veremos acá y, si bien no se lo utiliza, tiene una consecuencia muy importante.

Si se tiene un conjunto de n pares ordenados (x_i, y_i) tales que $x_i \neq x_j$ para todo $i \neq j$ (no hay puntos que repitan x con distintas y, o bien los puntos deben representa una relación funcional), se puede formar el siguiente sistema de ecuaciones:

$$
\begin{aligned}
c_1 * x_1^0 + c_2 * x_1^1 + c_3 * x_1^2 + \cdots + c_n * x_1^{n-1} &= y_1 \\
c_1 * x_2^0 + c_2 * x_2^1 + c_3 * x_2^2 + \cdots + c_n * x_2^{n-1} &= y_2 \\
c_1 * x_3^0 + c_2 * x_3^1 + c_3 * x_3^2 + \cdots + c_n * x_3^{n-1} &= y_3 \\
&\vdots \\
c_1 * x_n^0 + c_2 * x_n^1 + c_3 * x_n^2 + \cdots + c_n * x_n^{n-1} &= y_n
\end{aligned}
$$

Si los n puntos cumplen con la condición dada (pertenecen a la gráfica de la función), entonces la matriz de los coeficientes x_{ij} tiene un determinante distinto de cero, y el sistema es compatible determinado. Por lo tanto, el sistema de ecuaciones tiene solución y, como la tiene, es única. Es decir, si existe un polinomio interpolante, es único. No existe un polinomio del mismo grado que pase por todos los puntos y que sea distinto del polinomio interpolante. Entonces, si una ancianita los para en la calle para pedirles otro polinomio interpolante porque el que tiene no le sirve, deberán decirle que se conforme con el que tiene porque **otro no hay** (puede que la señora en cuestión intente sobornarlos con galletitas; es su deber ingenieril resistir la tentación de buscar otro polinomio interpolante, porque **no existe por definición**). Caso de ejemplo: por dos puntos ($n = 2$) pasa una única recta (polinomio de grado 1). Al que encuentre un contraejemplo le regalo un alfajor Fantoche.

Polinomio de Newton

"*En donde busques encontrarás algo 'de Newton'. Es como la peste, está en todos lados*"
Hooke, sobre Newton (cita apócrifa)

El polinomio de Newton se construye con una suma de productos. Cada término de la suma incorpora factores del tipo $(x - x_i)$ donde x_i es la *absisa* del i-ésimo punto dato, y un coeficiente a_i para cada término. Esta estructura conlleva que, para cada punto dato, se anularán *todos los términos menos uno, correspondiente a ese punto*, y los coeficientes permiten ajustar el polinomio para que pase por *todos los puntos dato*.

Los coeficientes del polinomio de Newton se obtienen mediante el cálculo de *diferencias divididas*. Las diferencias divididas se definen como:

$$f[x_0, \cdots, x_n] = \frac{f[x_1, \cdots, x_n] - f[x_0, \cdots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

Como ejemplos, la diferencia dividida cero respecto de x_i y la primera diferencia dividida respecto de x_i y x_{i+1} son, respectivamente:

$$
\begin{aligned}
f[x_i] &= f(x_i) \\
f[x_i, x_{i+1}] &= \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}
\end{aligned}
$$

Consideremos el peso en kg de alguien que bien puede haber (o no) pertenecido (o pertenecer) a esta cátedra, medido durante algunos meses:

Enero	Febrero	Marzo	Abril	Junio	Julio	Septiembre	Diciembre
95	95.5	97.2	97	97.6	98	101	103.3

a) Construir el polinomio interpolante usando la matriz de Vandermonde (en "x", el número de mes; en "y", el peso)

b) Armar una función que reciba los datos como dos vectores, construya las diferencias divididas y, con ellas, el polinomio interpolante de Newton (que devuelva los coeficientes del polinomio interpolante).

c) ¿Qué diferencias hay entre ambos polinomios interpolantes?

d) ¿Qué habría que hacer para reconstruir el polinomio de Newton si se agrega un punto el conjunto de datos? ¿Y si se cambia de abscisa?

Polinomios de Lagrange

Los polinomios de Lagrange se construyen de modo tal de hacer que cada polinomio pase por uno de los puntos dato y se anule en el resto (que se anule en el resto de los puntos dato, no en el resto del dominio; la "función" que vale 1 en un punto y 0 en el resto del dominio se conoce como *delta de Kronecker* y, si bien es muy interesante en sus propiedades y usos, está fuera del alcance de esta materia). Al sumar todos los polinomios de Lagrange, se obtiene un polinomio que pasa por todos los puntos dato.

Observemos más detenidamente el fenómeno.

Supongamos un conjunto de n puntos, y situémonos en el punto j. El *j-ésimo polinomio* pasará por el punto j, y será nulo en los otros *i-ésimos puntos con i distinto de j*. Por lo tanto la contribución de los i-ésimos polinomios, con i distinto de j será nula en el punto j. Lo mismo sucede para el resto de los puntos, formando un polinomio interpolante al pasar por todos los puntos dato. Entonces, cabe la siguiente pregunta:

¿Es distinto este polinomio interpolante del obtenido al invertir la matriz de Vandermonde?

Considere los puntos dados por los siguientes vectores:

```
vec_x = [1 1.3 2 2.9 3 4 7 12]
vec_y = [1 2 3 4 5 6 7 8 9]
```

a) Generar y graficar los distintos polinomios de Lagrange para ese conjunto de puntos.

b) Generar y graficar el polinomio interpolante sumando los polinomios de Lagrange.

c) Generar y graficar el polinomio interpolante mediante *polyfit* y *polyval*. Compararlo con el polinomio anterior.

d) Escribir una función que tome como argumentos dos vectores con las coordenadas de los puntos dato, y un vector con las abscisas de los puntos a evaluar, y devuelva un vector con el polinomio interpolante de Lagrange evaluado en las abscisas del tercer vector. Usar la función con los datos del peso de la persona que puede haber pertenecido o no a la cátedra y comparar con la interpolación con las obtenidas por los otros métodos.

Interpolación segmentaria

Este método de interpolación supone construir polinomios interpolantes de a tramos. El más simple es "unir con rectas", aunque no es muy utilizado al no generar soluciones derivables. El que le sigue en complejidad es "unir con arcos de parábola" o con "arcos de polinomios cúbicos". Estos dos métodos plantean un problema, porque ya no alcanza con las condiciones de identificación en los nodos (que la interpolación pase por los puntos dato) para que el problema quede bien definido: a priori, sobrarían variables por la cantidad de ecuaciones disponibles.

a) ¿Qué otras condiciones se agregan a estas interpolaciones para que el problema no quede sub-definido?

b) Investigar las funciones de Matlab/Octave *pchip* y *ppval* y resumir sus argumentos y resultados esperados.

c) Usar *pchip* y *ppval* con los datos del peso del supuesto miembro de la cátedra y comparar los resultados con las interpolaciones previas (graficar en el mismo lienzo y analizar las diferencias).

Problemas

1. Se sospecha que las grandes cantidades de tanino en hojas de roble maduro inhibe el crecimiento de las larvas de la polilla de invierno (*Operophtera bromata L., Geometridae*) que daña profundamente estos árboles en determinados años. La siguiente tabla muestra el peso promedio de dos muestras de larva en diferentes momentos en los primeros 28 días luego de nacer. La primera muestra creció en hojas jóvenes de roble mientras que la segunda creció en hojas maduras del mismo árbol.

   a) Interpole para aproximar las curvas de peso promedio para las dos muestras.

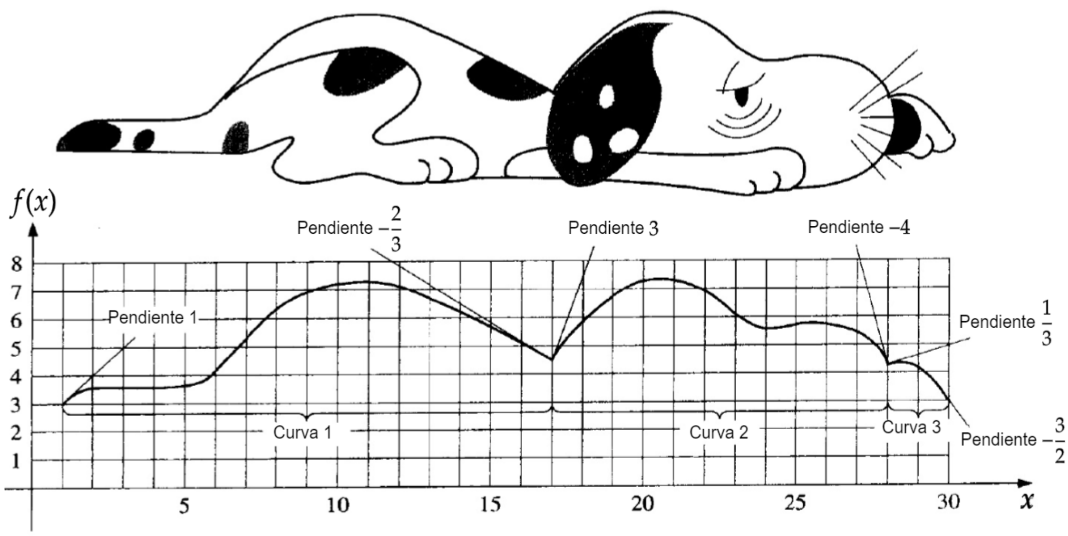
   b) Encuentre el peso promedio máximo para cada muestra.

Día	0	6	10	13	17	20	28
Peso promedio de la primera muestra [mg]	6.67	17.33	42.67	37.33	30.10	29.31	28.74
Peso promedio de la segunda muestra [mg]	6.67	16.11	18.89	15.00	10.56	9.44	8.89

2. Por alguna razón que no interesa, se quiere aproximar la curva que describe la parte superior de la noble bestia que se observa en la siguiente figura.

   a) Construya un polinomio interpolante con la tabla adjunta para resolver el problema. Luego, genere un vector denso (más puntos de abscisa) e interprete qué sucede.

   b) A fin de solucionar el problema anterior, utilice splines cúbicos incorporando los datos de pendiente que se observan en la figura.



Curva 1				Curva 2				Curva 3			
i	x_i	$f(x_i$	$f'(x_i)$	i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$	i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$
0	1	3.0	1.0	0	17	4.5	3.0	0	27.7	4.1	0.33
1	2	3.7		1	20	7.0		1	28	4.3	
2	5	3.9		2	23	6.1		2	29	4.1	
3	6	4.2		3	24	5.6		3	30	3.0	-1.5
4	7	5.7		4	25	5.8					
5	8	6.6		5	27	5.2					
6	10	7.1		6	27.7	4.1	-4.0				
7	13	6.7									
8	17	4.5	-0.67								

3. Emplee la porción de la tabla de vapor que se da para el H_2O sobrecalentado a 200 MPa para:

   a) Encontrar la entropía correspondiente s para un volumen específico v de 0.108 m^3/kg con interpolación lineal.

   b) Encontrar la misma entropía correspondiente con el uso de interpolación cuadrática

   c) Hallar el volumen correspondiente a una entropía de 6.6

v [m$^3/kg$]	0.10377	0.11144	0.1254
s [kJ/kg $\cdot$ K]	6.4147	6.5453	6.7664

4. Los siguientes datos definen la concentración de oxígeno disuelto a nivel del mar para agua dulce como función de la temperatura:

T [°C]	0	8	16	24	32	140
o [mg/L]	14.621	11.843	9.870	8.418	7.305	6.413

   Estime o(27) usando:

   a) Interpolación lineal

   b) Polinomio de interpolación de Newton

   c) Spline cúbico

   Observe que el resultado exacto es 7.986 mg/L.

Ajuste

A diferencia de la interpolación, el ajuste no tiene la necesidad de pasar por todos los puntos dato. Solamente busca representar correctamente la *tendencia* de los datos cosa que, muchas veces, es más útil que pasar por todos ellos. En muchas ocasiones es incluso imposible realizar una interpolación, dejando al ajuste como única alternativa. El ejemplo inmediato es la situación en la que los puntos no representan la gráfica de una función, por contener datos de diferentes ordenadas para la misma abscisa dentro del conjunto de datos (por ejemplo, si se consideraran los pesos de los distintos integrantes de la cátedra en el mismo período de tiempo; habría un dato de peso por integrante, pero igual cantidad de meses).

Use los siguientes vectores:

```
vec1 = [1 2 3 4 5 6 7 9 12 ...
        1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 ...
        1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12]; %abscisas
vec2 = [95 95.5 97.2 97 97.6 98 101 103 ...
        76 78 78 79 78.5 77 76.2 75.6 74.9 74.1 73.4 72.8 ...
        71 71.2 71.4 71.3 70.9 71.3 71.6 71.5 71.1 70.8 71.2
           71.3]; %ordenadas
```

Los puntos suspensivos son en Matlab/Octave, "*caracteres de continuación de línea*". Sirven para darle claridad al código, al permitir que una línea demasiado larga pueda dividirse en varias líneas, facilitando su lectura e interpretación por humanos pero sin afectar la ejecución del programa.

a) Construir el polinomio interpolante de estos dos vectores usando la matriz de Vandermonde.¿Se puede?

b) Ídem a), pero con la función que construye el polinomio de Newton (realizada en un punto anterior).

c) Usar *polyfit* para obtener los coeficientes de un ajuste polinómico de grado 31. ¿Son los coeficientes obtenidos, los de un polinomio interpolante?¿Cómo determinaría si se trata o no del polinomio interpolante? Determinar si se trata o no del polinomio interpolante.

d) ¿Por qué se pregunta si un ajuste polinómico de grado 31 sobre un conjunto de 32 puntos puede resultar en el polinomio interpolante?

e) Programar un script que realice los ajustes polinómicos de grado 1 al grado 5 para los datos dados, y los muestre en el mismo gráfico. Para graficar los polinomios, evaluar cada uno de ellos 30 veces por intervalo original (lo que daría una idea de la variación de peso diaria de los integrantes de la cátedra). ¿Cuál es el ajuste más razonable?¿Con qué criterio?

f) Programar una función que tenga como entradas un vector de coeficientes, un vector de abscisas y un vector de ordenadas, y de como resultado el error cuadrático medio del polinomio dado por los coeficientes al ajustar los datos suministrados.

g) Generar tres conjuntos de vectores de pares ordenados:

- mes_R y Peso_R
- mes_Le y Peso_Le
- mes_Lu y Peso_Lu

Realizar ajustes de grado independiente para cada conjunto de datos y calcular, en cada caso, el error cuadrático medio.¿Es el error cuadrático medio el mejor indicador de calidad del ajuste en todos los casos?

h) Análisis de la pandemia COVID-19 Si bien estudiamos ingeniería, las herramientas que estudiamos nos permiten, con asiduidad, analizar sistemas y fenómenos que no competen el ámbito estricto de la ingeniería. Como ejemplo, en este caso, proponemos la pandemia de COVID-19 que, en Argentina, nos obligó al aislamiento durante gran parte del año 2020 y el principio de 2021. Para ello vamos a suponer que la variación del número de infectados depende del número de infectados; es decir, a mayor cantidad de gente infectada, mayor será la velocidad de propagación de la enfermedad. La hipótesis es razonable, y conlleva a un crecimiento exponencial del número de afectados en el tiempo. Esta es la hipótesis más simple, y no introduce otros factores posiblemente relevamentes en el modelo epidemiológico.

La tabla siguiente fue construido con datos del Ministerio de Salud de la Nación:

Días	Casos nuevos	Casos totales
1	79	1133
2	132	1265
3	88	1353
4	98	1451
5	103	1554
6	74	1628
7	87	1715
10	81	1975
15	128	2571
20	90	3031
25	173	3780
30	143	4428
35	134	5020
40	258	6034
45	345	7479
50	474	9283
60	795	16214
91	2262	64530
122	5929	191302
153	9309	441735
183	14392	751001
214	9745	1166924
244	5726	1257227
275	11765	1613928
306	4975	1927239
334	3168	2107365
365	16056	2348821

El objetivo del ejercicio es analizar a partir de qué momento deja de cumplirse la hipótesis inicial, porque existen otros factores (más allá de la cantidad de contagiados) que afectan la propagación del virus.

Problemas

1. La Tabla 1 contiene las notas de las tareas y notas finales de 30 estudiantes de análisis numérico. Realice un ajuste y estime las notas necesarias para obtener nota final mínima de 60 y de 90.

Tarea	Nota final	Tarea	Nota final
302	45	323	83
325	72	337	99
285	54	337	70
339	54	304	62
334	79	319	66
322	65	234	51
331	99	337	53
279	63	351	100
316	65	339	67
347	99	343	83
343	83	314	42
290	74	344	79
326	76	185	59
233	57	340	75
254	45	316	45

2. En un paper sobre la eficiencia en la utilización de la energía de la larva de la polilla esfinge modesta (*Pachysphinx modesta*), L. Schroeder utilizó los siguientes datos para encontrar una relación entre W, el peso de la larva en gramos, y R, el consumo de oxígeno de la larva en mL/hora. Por razones biológicas, se asume que la relación entre R y W es de la forma $R = bW^a$.

   a) Encuentre la recta de ajuste de mínimos cuadrados logarítmico planteando:
   $$\ln(R) = \ln(b) + a * \ln(W).$$
   b) Calcule el error cuadrático asociado:
   $$E = \sum_{i=1}^{37} (R_i - bW_i^a)$$
   c) Recalcule el ajuste realizado, agregando el término cuadrático $c * (\ln(W_i))^2$
   d) Determine la relación correspondiente y calcule el error cuadrático asociado al nuevo ajuste.

W	R	W	R	W	R	W	R	W	R
0.017	0.154	0.025	0.23	0.020	0.181	0.020	0.180	0.025	0.234
0.087	0.296	0.111	0.357	0.085	0.260	0.119	0.299	0.233	0.537
0.174	0.363	0.211	0.366	0.171	0.334	0.210	0.428	0.783	1.47
1.11	0.531	0.999	0.771	1.29	0.87	1.32	1.15	1.35	2.48
1.74	2.23	3.02	2.01	3.04	3.59	3.34	2.83	1.69	1.44
4.09	3.58	4.28	3.28	4.29	3.40	5.48	4.15	2.75	1.84
5.45	3.52	4.58	2.96	5.30	3.88	5.53	6.94	4.83	4.66
5.96	2.40	4.68	5.10						

3. Un investigador informa sobre los datos tabulados a continuación de un experimento para determinar la tasa de crecimiento de bacterias k (por día), como función de la concentración de oxígeno c (mg/L). Se sabe que dichos datos pueden modelarse por medio de la ecuación siguiente:
$$k = \frac{k_{\max} c^2}{c_s + c^2},$$

donde c_s y $k_{\max}$ son parámetros. Use una transformación para hacer lineal esta ecuación. Después utilice un ajuste lineal para estimar c_s y $k_{\max}$, y pronostique la tasa de crecimiento para $c = 2$ mg/L.

c	0.5	0.8	1.5	2.5	4
k	1.1	2.4	5.3	7.6	8.9

4. Después de una tormenta, se vigila la concentración de la bacteria *E. coli* en un área de natación:

t [h]	4	8	12	16	20	24
c [CFU/100 mL]	1600	1320	1000	890	650	560

El tiempo se mide en horas transcurridas después de finalizar la tormenta, y la unidad CFU es “una unidad de formación de colonia”. Utilice los datos para estimar:

a) La concentración al final de la tormenta (t = 0).

b) El tiempo en el que la concentración alcanzará 200 CFU/100 mL.

Observe que la elección del modelo debe ser consistente con el hecho de que las concentraciones negativas son imposibles y de que la concentración de bacterias siempre disminuye con el tiempo.

Referencias

[1] Burden, R. L. *Numerical Analysis*, 2019

[2] RP, C. S. C. *Numerical methods for engineers*, 2002