Métodos Numéricos

Ajuste de Curvas

Daniel Barragán [1]

[1] Escuela de Ingeniería de Sistemas y Computación
Universidad del Valle

May 12, 2015

Agenda

Ajuste de Curvas.
Introducción.

- En esta sección se trata el problema de ajustar un modelo matemático (curva) a un conjunto de datos discretos
- Cuando el conjunto de datos presenta error, el modelo matemático (curva) representa la tendencia de los datos (Regresión)
- Cuando el conjunto de datos no presenta error, el modelo matemático (curva o curvas) contiene todo el conjunto de datos (Interpolación)

¿Que es regresión?

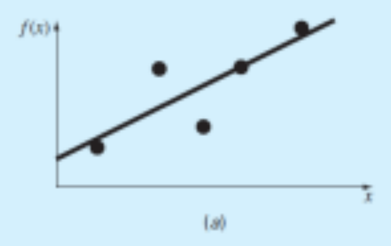
Es encontrar la ecuación que representa la tendencia de un conjunto de datos

¿Que es interpolación?

Dado un conjunto de datos, predecir otros datos. Esta se hace punto a punto.

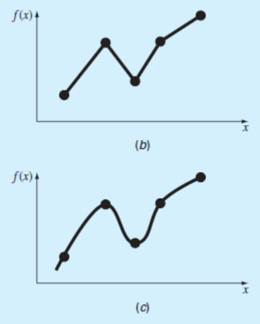
Ajuste de Curvas.
Introducción.

- Regresión



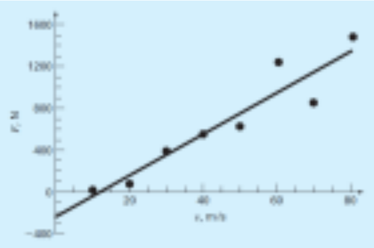
Ajuste de Curvas.
Introducción.

- Interpolación



Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Dado un conjunto de observaciones $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$, se busca obtener la línea recta que siga la tendencia de los puntos



Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Dado un conjunto de observaciones $(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n)$, la expresión matemática para una línea recta que aproxima la tendencia de las observaciones es

$$y = a_0 + a_1 x + e$$

Donde:
a_0 es el intercepto
a_1 es la pendiente
e es el error entre las observaciones y el modelo

Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Los parámetros a_0 y a_1 definen una recta. El objetivo es encontrar los parámetros a_0 y a_1 que minimicen el error respecto a las observaciones

$$e = y \overbrace{- a_0 - a_1 x}^{\text{modelo}}$$

Donde:
y es el valor de la observación
$a_0 + a_1 x$ es el valor aproximado por la ecuación lineal

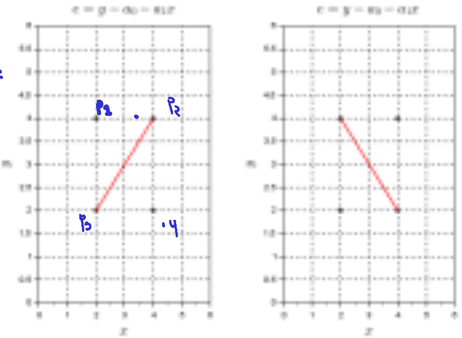
Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Tomando $e = y - a_0 - a_1 x$
- En la gráfica de la izquierda $e = 2 + 0 + 0 - 2 = 0$

$e_{diferen} = V_{real} - V_{ex}$

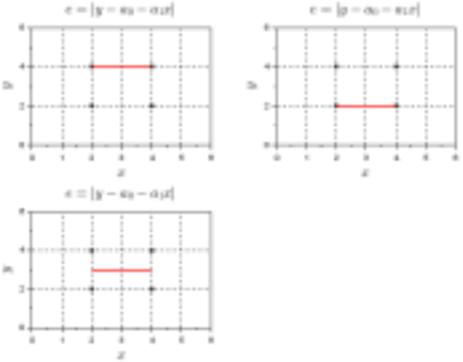
$2+0+0-2$

$e_{dif} = 0$



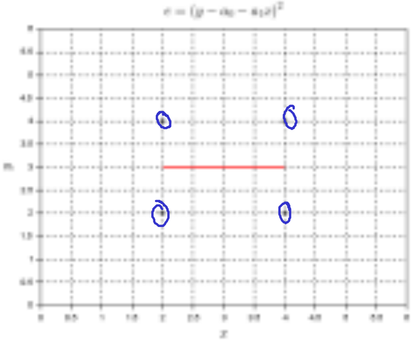
Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Tomando $e = |y - a_0 - a_1 x|$
- En la gráfica superior-izquierda $e = 0 + 0 + 2 + 2 = 4$
- En la gráfica inferior-izquierda $e = 1 + 1 + 1 + 1 = 4$



Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Tomando $e = (y - a_0 - a_1 x)^2$
- En la gráfica $e = 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 = 4$
- ¿Que sucede en otros casos?



Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

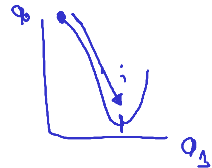
- La estrategia en el método de mínimos cuadrados es minimizar la sumatoria de los cuadrados del error.
- Los cuadrados del error son tambien conocidos como residuos (residuals)

$y = a_1 x + a_0$

$$min(S_r) = \boxed{min(\sum_{i=1}^{n} e_i^2)} = min\boxed{(\sum_{i=1}^{n}}(y_i - a_0 - a_1 x_i)^2)$$

$$\min(e^2) = \min\left(\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \underline{a_1}x - \underline{a_0}\right)\right)^2$$

$$0 = \frac{\partial e}{\partial a_1} = 2\left(\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_1x - a_0)\right)(-x)$$



$$0 = \frac{\partial e}{\partial a_0} = 2\left(\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_1x - a_0)\right) \times (-1)$$

$$\begin{cases} 0 = \sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} a_0 x_i \\ 0 = \sum_{i=1}^{n} y_i - \sum_{i=1}^{n} a_1 x - \sum_{i=1}^{n} a_0 \end{cases}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^2 + \sum_{i=1}^{n} a_0 x_i$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = \sum_{i=1}^{n} a_1 x + \sum_{i=1}^{n} a_0$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{bmatrix}$$

Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- Las fórmulas para encontrar a_0 y a_1 se obtienen de la siguiente manera

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum(y_i - a_0 - a_1 x_i)$$
$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum[(y_i - a_0 - a_1 x_i)x_i]$$

Igualando a cero

$$0 = \sum y_i - \sum a_0 - \sum a_1 x_i$$
$$0 = \sum x_i y_i - \sum a_0 x_i - \sum a_1 x_i^2$$

Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

Reordenando, se obtiene un sistema de ecuaciones lineal de dos incognitas a_0 y a_1

$$na_0 + (\sum x_i)a_1 = \sum y_i$$
$$(\sum x_i)a_0 + (\sum x_i^2)a_1 = \sum x_i y_i$$

Solucionando el sistema de ecuaciones se tiene

$$a_1 = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$
$$a_0 = \overline{y} - a_1\overline{x}$$

Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- **Problema** Ajuste una línea a los valores de la tabla empleando la técnica de mínimos cuadrados. *x* es la variable independiente (m/s), *y* es la variable dependiente (N)

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
1	10	25	100	250
2	20	70	400	1,400
3	30	380	900	11,400
4	40	550	1,600	22,000
5	50	610	2,500	30,500
6	60	1,220	3,600	73,200
7	70	830	4,900	58,100
8	80	1,450	6,400	116,000
Σ	360	5,135	20,400	312,850

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i x_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i \end{bmatrix}$$

x_i	y_i
10	25
20	70
30	380
40	550
50	610
60	1,220
70	830
80	1,450
360	5135

$\sum x_i^2 = 20400$

$\sum x_i y_i = 312850$

$$\begin{bmatrix} 20400 & 360 \\ 360 & 8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 312850 \\ 5135 \end{bmatrix}$$

$$-\frac{360}{20400} \qquad \begin{bmatrix} 20400 & 360 \\ 0 & \frac{28}{17} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 312850 \\ -\frac{6560}{17} \end{bmatrix}$$

$$\frac{28}{17} a_0 = -\frac{6560}{17}$$

$$a_0 = -\frac{1640}{7}$$

$$\frac{163200}{20400} - \frac{360^2}{20400} = \frac{33600}{20400} = \frac{336}{204} = \frac{28}{17}$$

$$\frac{104754000}{20400} - \frac{312850 \times 360}{20400} = -\frac{7872000}{20400} = -\frac{6560}{17}$$

$$20400 \times a_1 + 360\left(-\frac{1640}{7}\right) = \frac{2189950}{7}$$

$$a_1 = \frac{2780350}{7 \times 20400} = \frac{3271}{168}$$

Regresión Lineal
Mínimos Cuadrados

- **Solución**

$$a_1 = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$a_1 = \frac{8(312850) - 360(5135)}{8(20400) - (360)^2} = 19.47024$$

$$a_0 = \overline{y} - a_1\overline{x}$$

$$\overline{y} = \frac{5135}{8} = 641.875, \ \overline{x} = \frac{360}{8} = 45$$

$$a_0 = 641.875 - 19.47024(45) = -234.2857$$

$$F = -234.2857 + 19.47024v$$

Regresión Lineal
Cuantificación del error

- El error estandar de la estimación se calcula por medio de

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}}$$

n>2

Donde
$S_r = \sum(y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$

Regresión Lineal
Cuantificación del error

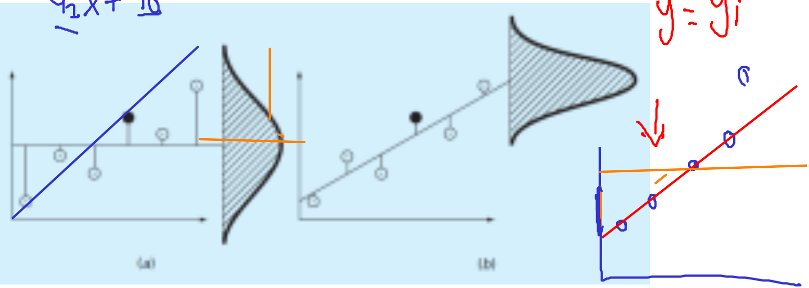
- El error de regresión se calcula como la diferencia entre una aproximación por medio de la línea que resulta de la media de los puntos y la línea que resulta de la regresión

$a_1 = 0$

$a_0 = \bar{y}$

$a_1 x + a_0$

$y = y_i$



Regresión Lineal

Cuantificación del error

- El coeficiente de determinación r^2 y el coeficiente de correlación r se calculan de la siguiente manera

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

$$r = \sqrt{\frac{S_t - S_r}{S_t}}$$

$r = 1 \longrightarrow 0$

$S_r \rightarrow 0 - S_t$

Donde

$$S_t = \sum (y_i - \overline{y})^2$$

$$S_r = \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

Regresión Lineal
Cuantificación del error

- El mejor resultado se obtiene con $r^2 = 1$. $r^2 = 1$ implica que $S_r = 0$. Este resultado indica que la recta se ajusta a los datos perfectamente.
- Un resultado de $r^2 = 0$ implica $S_r = S_t$. Este resultado indica que no hay mejora con la regresión.

$$\sum_{i=1}^{n} x_i^2 \neq \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2$$

Regresión Lineal
Cuantificación del error

- **Problema** Encuentre el error estandar de la estimación, el coeficiente de determinación y el coeficiente de correlación para los datos de la tabla

$S_T = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$ $\quad r = \sqrt{\frac{S_T - S_r}{S_T}}$ $\quad S_r = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$

i	x_i	y_i	$a_0 + a_1 x_i$	S_T $(y_i - \bar{y})^2$	$(y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$
1	10	25	−39.58	380,535	4,171
2	20	70	155.12	327,041	7,245
3	30	380	349.82	68,579	911
4	40	550	544.52	8,441	30
5	50	610	739.23	1,016	16,699
6	60	1,220	933.93	334,229	81,837
7	70	830	1,128.63	35,391	89,180
8	80	1,450	1,323.33	653,066	16,044
Σ	360	5,135		1,808,297	216,118

$\bar{y} = \frac{5135}{8}$ 641.875 $\quad a_0 + a_1 x_i$ $\quad S_r$

$$z = F(x, y)$$

$$(x_i, y_i, z_i)$$

$$\underbrace{a_0 + a_1 x + a_2 y}_{\text{modelo}}$$

$$e = z_i - \overbrace{a_0 - a_1 x_i - a_2 y_i}$$

$$\min(S_r) = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(z_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 y_i\right)^2$$

$$0 = \frac{\partial S_r}{\partial a_0} = 2\sum_{i=1}^{n} \left(z_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 y_i\right)(-1)$$

$$0 = \frac{\partial S_r}{\partial a_1} = 2\sum_{i=1}^{n} \left(z_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 y_i\right)(-x_i)$$

$$0 = \frac{\partial S_r}{\partial a_2} = 2\sum_{i=1}^{n} \left(z_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 y_i\right)(-y_i)$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i & \sum_{i=1}^{n} y_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} z_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i z_i \\ \sum_{i=1}^{n} y_i z_i \end{bmatrix}$$

Regresión Lineal
Cuantificación del error

$S_{y/x} = \sqrt{\frac{Sr}{n-2}}$

- **Solución**

$$s_{\frac{y}{x}} = \sqrt{\frac{216118}{8-2}}$$

$S_T \quad - S_r$

$$r^2 = \frac{1808297 - 216118}{1808297} = 0.8805$$

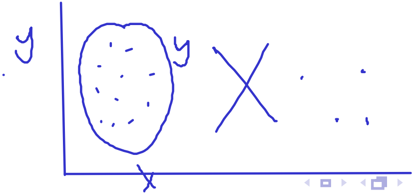
S_T

$$r = 0.9383$$

Regresión Lineal
Comentarios generales

Para emplear el método de mínimos cuadrados se debe tener en cuenta:

- Los valores de x se conocen sin error
- Los valores de y tienen la misma varianza
- Los valores de y tienen un comportamiento de distribución normal



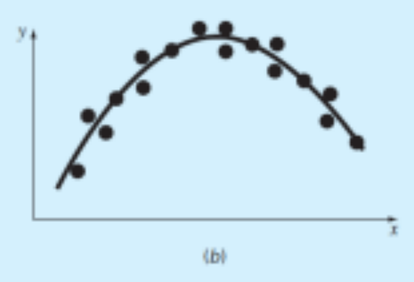
Regresión Polinomial.
Introducción.

- Un conjunto de datos que exhibe un patrón podría no ser bien representado por una línea recta

(a)

Regresión Polinomial.
Introducción.

- Para estos casos una alternativa es usar transformaciones, la otra alternativa es ajustar los datos a un polinomio



Regresión Polinomial.
Mínimos Cuadrados.

- La técnica de mínimos cuadrados se puede extender a polinomios de mayor orden (orden ≥ 2)

$$y = \underbrace{a_0 + a_1 x + a_2 x^2}_{\text{modelo}} + \underbrace{e}_{\text{Error}}$$

$$\min(S_r) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x - a_2 x^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = 0 \qquad \frac{\partial S_r}{\partial a_1} = 0 \qquad \frac{\partial S_r}{\partial a_2} = 0$$

Regresión Polinomial.
Mínimos Cuadrados.

- Encontrando las derivadas parciales del error

$$S_r = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum \underline{x_i}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum \underline{x_i^2}(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)$$

Regresión Polinomial.

Mínimos Cuadrados.

- Igualando a cero y reordenando las ecuaciones se obtiene el siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$(n)a_0 + (\sum x_i)a_1 + (\sum x_i^2)a_2 = \sum y_i$$

$$(\sum x_i)a_0 + (\sum x_i^2)a_1 + (\sum x_i^3)a_2 = \sum x_i y_i$$

$$(\sum x_i^2)a_0 + (\sum x_i^3)a_1 + (\sum x_i^4)a_2 = \sum x_i^2 y_i$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Regresión Polinomial.

Mínimos Cuadrados.

- Determinar los coeficientes de un polinomio de orden m corresponde a solucionar un sistema de $m+1$ ecuaciones

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_m x^m + e$$

$m = 8$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} \longrightarrow \frac{\partial S_r}{\partial a_8}$$

Regresión Polinomial.
Cuantificación del error.

- El error estándar al ajustar una curva por medio de un polinomio de orden m a partir de un conjunto de n observaciones es

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (\underbrace{m}_{m=2} + 1)}}$$

- El coeficiente de determinación se calcula de la siguiente manera

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

Regresión Polinomial.
Cuantificación del error.

- **Problema:** Ajustar un polinomio de segundo orden a los datos de las dos primeras columnas de la tabla y encontrar el error estándar y el coeficiente de correlación

x_i	y_i	$(y_i - \bar{y})^2$	$(y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)^2$
0	2.1	544.44	0.14332
1	7.7	314.47	1.00286
2	13.6	140.03	1.08160
3	27.2	3.12	0.80487
4	40.9	239.22	0.61959
5	61.1	1272.11	0.09434
$\sum$	152.6	2513.39	3.74657

Regresión Polinomial.
Cuantificación del error.

- **Solución:**

$$
\begin{array}{ccc}
m = 2 & \sum x_i = 15 & \sum x_i^4 = 979 \\
n = 6 & \sum y_i = 152.6 & \sum x_i y_i = 585.6 \\
\overline{x} = 2.5 & \sum x_i^2 = 55 & \sum x_i^2 yi = 2488.8 \\
\overline{y} = 25.433 & \sum x_i^3 = 225 &
\end{array}
$$

Regresión Polinomial.
Cuantificación del error.

$$\begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 152.6 \\ 585.6 \\ 2488.8 \end{bmatrix}$$

$$a = [2.4786, 2.3593, 1.8607]'$$

$$y = 2.4786 + 2.3593x + 1.8607x^2$$

$$s_{\frac{y}{x}} = \sqrt{\frac{3.74657}{6-(2+1)}} = 1.1175$$

$$r^2 = \frac{2513.39 - 3.74657}{2513.39} = 0.99851$$

$$r = 0.99925$$

Regresión Multivariable.

Introducción.

- La técnica de regresión puede aplicarse al caso donde y es una función lineal de dos o más variables
- Para el caso de dos dimensiones la regresión esta determinada por un plano
- Por ejemplo y puede ser una función lineal de x_1 y x_2

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + e$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} \quad \frac{\partial S_r}{\partial a_1} \quad \frac{\partial S_r}{\partial a_2} \quad S_r = \sum_{i=n}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x_1 - a_2 x_2)^2$$

Regresión Multivariable.
Mínimos Cuadrados.

- Encontrando las derivadas parciales del error

$$S_r = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i})^2$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum(y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i})$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum x_{1,i}(y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i})$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum x_{2,i}(y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i})$$

Regresión Multivariable.
Mínimos Cuadrados.

- Igualando a cero y reordenando las ecuaciones se obtiene el siguiente sistema lineal de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_{1,i} & \sum x_{2,i} \\ \sum x_{1,i} & \sum x_{1,i}^2 & \sum x_{1,i}x_{2,i} \\ \sum x_{2,i} & \sum x_{1,i}x_{2,i} & \sum x_{2,i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1,i}y_i \\ \sum x_{2,i}y_i \end{bmatrix}$$

Regresión Multivariable.
Mínimos Cuadrados.

- **Problema** Emplear la técnica de regresión lineal múltiple para ajustar los datos de la tabla a una curva.

y	x_1	x_2	x_1^2	x_2^2	x_1x_2	x_1y	x_2y
5	0	0	0	0	0	0	0
10	2	1	4	1	2	20	10
9	2.5	2	6.25	4	5	22.5	18
0	1	3	1	9	3	0	0
3	4	6	16	36	24	12	18
27	7	2	49	4	14	189	54
54	16.5	14	76.25	54	48	243.5	100

Regresión Multivariable.
Mínimos Cuadrados.

- **Solución**

$$\begin{bmatrix} 6 & 16.5 & 14 \\ 16.5 & 76.25 & 48 \\ 14 & 48 & 54 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 54 \\ 243.5 \\ 100 \end{bmatrix}$$

Regresión Multivariable.

Mínimos Cuadrados.

- El caso anterior se puede extender a m dimensiones

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + ... + a_m x_m + e$$

$$y_i = a_0 \operatorname{sen}(x_i) + a_1 \tan(x_i)$$

$$e = \left(y_i - \underline{a_0} \operatorname{Sen}(x_i) - \underline{a_1} \tan(x_i)\right)^2$$

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \underline{a_0} \operatorname{Sen}(x_i) - \underline{a_1} \tan(x_i)\right)^2$$

Cte para a_0 y a_1

$$\frac{\partial S_r}{\partial \underline{a_0}} = 2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \underline{a_0} \underbrace{\operatorname{Sen}(x_i)}_{} - \underline{a_1} \tan(x_i)\right) \times \left(-\operatorname{Sen}(x_i)\right)$$

Cte

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = 2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \underline{a_0} \operatorname{Sen}(x_i) - \underline{a_1} \tan(x_i)\right)^2 \left(-\tan(x_i)\right)$$

Cte

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 e^{x_i} \right)^2$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 e^{x_i} \right) e^{x_i}$$

cte para a_0

Interpolación.
Introducción.

- La siguiente tabla muestra la densidad y viscosidad del aire en función de la temperatura

x_0 x_1 y_0 y_1

T, °C	ρ, kg/m³	μ, N · s/m²	ν, m²/s
−40	1.52	1.51×10^{-5}	0.99×10^{-5}
0	1.29	1.71×10^{-5}	1.33×10^{-5}
20	1.20	1.80×10^{-5}	1.50×10^{-5}
50	1.09	1.95×10^{-5}	1.79×10^{-5}
100	0.946	2.17×10^{-5}	2.30×10^{-5}
150	0.835	2.38×10^{-5}	2.85×10^{-5}
200	0.746	2.57×10^{-5}	3.45×10^{-5}
250	0.675	2.75×10^{-5}	4.08×10^{-5}
300	0.616	2.93×10^{-5}	4.75×10^{-5}
400	0.525	3.25×10^{-5}	6.20×10^{-5}
500	0.457	3.55×10^{-5}	7.77×10^{-5}

Interpolación.
Introducción.

- Al necesitar un dato que no esta en la tabla se debe interpolar, es decir, encontrar el valor deseado con base en los valores adyacentes
- La forma más fácil de interpolar sería conectar los valores adyacentes por medio de una línea
- Cuando los datos presentan algún grado de curvatura lo más conveniente es encontrar un polinomio con base en los datos

Interpolación.

Introducción.

- La fórmula general para un polinomio de orden m es la siguiente

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_m x^m$$

- Para un conjunto de n puntos, existe únicamente un polinomio de orden $m = (n - 1)$ que pasa a través de los puntos
- *Ejemplo:* una línea (orden 1) está determinada por dos puntos, una parábola (orden 2) está determinada por tres puntos

Interpolación.
Introducción.

- **Problema:** Determine los coeficientes de la parábola $f(x) = p_0x^2 + p_1x + p_2$, que pasa a través de los siguientes valores

$$x_1 = 300, f(x_1) = 0.616$$
$$x_2 = 400, f(x_2) = 0.525$$
$$x_3 = 500, f(x_3) = 0.457$$

Nota: Para solucionar el problema construya un sistema de ecuaciones, resuelvalo y encuentre el número de condición de la matriz de coeficientes

Interpolación.
Introducción.

- **Solución:**

$$\begin{aligned} 0.616 &= p_0(300)^2 + p_1(300) + p_2 \\ 0.525 &= p_0(400)^2 + p_1(400) + p_2 \\ 0.457 &= p_0(500)^2 + p_1(500) + p_2 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 90000 & 300 & 1 \\ 160000 & 400 & 1 \\ 250000 & 500 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.616 \\ 0.525 \\ 0.457 \end{bmatrix}$$

$$p = [0.00000115, -0.001715, 1.027]'$$

$$f(x) = 0.00000115x^2 - 0.001715x + 1.027$$

Interpolación.

Introducción.

- Las matrices que siguen la forma de *Vandermonde* son altamente mal condicionadas

$$\begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ x_3^2 & x_3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum f(x_1) \\ \sum f(x_2) \\ \sum f(x_3) \end{bmatrix}$$

- A causa de esto se emplean otras formas para encontrar los coeficientes que no presenten esta condición

Interpolación.

Introducción.

- **Problema:** Obtenga el número de condición para la matriz A, comente sobre la estabilidad de la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 90000 & 300 & 1 \\ 160000 & 400 & 1 \\ 250000 & 500 & 1 \end{bmatrix}$$

Interpolación de Newton.
Introducción.

- Existen otras formas de expresar un polinomio de interpolación distintas a la forma general
- El polinomio de interpolación de Newton es una de aquellas formas
- A continuación se presenta la derivación lineal, cuadrática y finalmente la forma general para polinomios de interpolación de Newton

Interpolación de Newton.

Lineal.

- La forma más simple de interpolación es conectar dos puntos con una línea recta

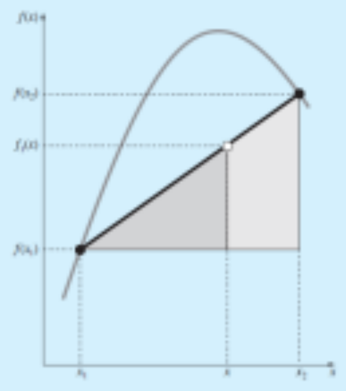
Interpolación de Newton.
Lineal.

Por ley de triángulos:

$$\frac{f_1(x) - f(x_1)}{x - x_1} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

Reordenando:

$$f_1(x) = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1)$$



Interpolación de Newton.
Lineal.

- **Problema:** Estimar el logaritmo natural de 2 empleando interpolación lineal. Realice los cálculos entre $ln(1) = 0$ y $ln(6) = 1.791759$. Repita el procedimiento desde $ln(1)$ hasta $ln(4) = 1.386294$. Note que el valor verdadero de $ln(2) = 0.6931472$

Interpolación de Newton.
Lineal.

- **Solución:**

Desde 1 hasta 6

$$f_1(2) = 0 + \frac{1.791759 - 0}{6 - 1}(2 - 1) = 0.3583519$$

$$\varepsilon_t = \frac{0.6931472 - 0.3583519}{0.6931472}(100) = 48,3\%$$

Desde 1 hasta 4

$$f_1(2) = 0 + \frac{1.386294 - 0}{4 - 1}(2 - 1) = 0.4620981$$

$$\varepsilon_t = \frac{0.6931472 - 0.4620981}{0.6931472}(100) = 33,3\%$$

Interpolación de Newton.
Cuadrática.

- Una forma de mejorar los resultados de la interpolación, es introducir un grado de curvatura a la línea que atraviesa el conjunto de puntos
- Con tres puntos se puede interpolar por medio de un polinomio de segundo orden (forma cuádratica o parábola)
- La forma de un polinomio de interpolación de Newton de segundo orden es la siguiente

$$f_2(x) = b_0 + b_1(x - x_1) + b_2(x - x_1)(x - x_2)$$

Interpolación de Newton.
Cuadrática.

Para determinar el valor del coeficiente b_0, se hace $x = x_1$

$$b_0 = f(x_1)$$

Para determinar el valor del coeficiente b_1, se hace $x = x_2$

$$b_1 = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

Para determinar el valor del coeficiente b_2, se hace $x = x_3$

$$b_2 = \frac{\frac{f(x_3)-f(x_2)}{x_3-x_2} - \frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}}{x_3 - x_1}$$

Interpolación de Newton.
Cuadrática.

- **Problema:** Estimar el logaritmo natural de 2 empleando interpolación cuadrática (polinomio de segundo orden) a partir de los siguientes puntos

$$x_1 = 1, f(x_1) = 0$$
$$x_2 = 4, f(x_2) = 1.386294$$
$$x_3 = 6, f(x_3) = 1.791759$$

Interpolación de Newton.
Cuadrática.

- **Solución:**

$$b_0 = 0$$

$$b_1 = \frac{1.386294 - 0}{4 - 1} = 0.4620981$$

$$b_2 = \frac{\frac{1.791759 - 1.386294}{6-4} - 0.4620981}{6 - 1} = -0.0518731$$

$$f_2(x) = 0 + 0.4620981(x - 1) - 0.0518731(x - 1)(x - 4)$$

$$f_2(2) = 0.5658444$$

$$\varepsilon_t = \frac{0.6931472 - 0.5658444}{0.6931472}(100) = 18.4\%$$

Interpolación de Newton.

General.

- El análisis para el caso lineal y el caso cuadrático, permiten generalizar para un polinomio de Newton de orden m

$$f_m(x) = b_0 + b_1(x - x_1) + ... + b_m(x - x_1)(x - x_2)...(x - x_m)$$

- Los coeficientes se encuentran de la siguiente manera

$$\begin{aligned} b_0 &= f(x_1) \\ b_1 &= f[x_2, x_1] \\ b_2 &= f[x_3, x_2, x_1] \\ b_m &= f[x_{m+1}, x_m, ..., x_2, x_1] \end{aligned}$$

Interpolación de Newton.

General.

- Las funciones con corchetes corresponden al cálculo de diferencias finitas

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$$

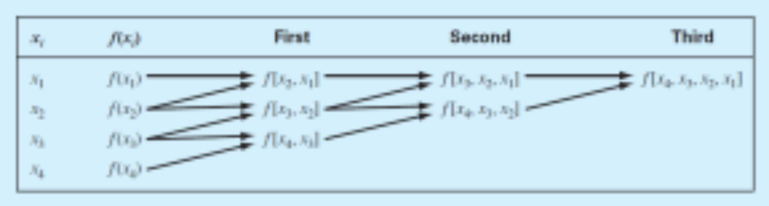
$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$$

$$f[x_{m+1}, x_m, ..., x_2, x_1] = \frac{f[x_{m+1}, x_m, ..., x_2] - f[x_m, x_{m-1}, ..., x_1]}{x_{m+1} - x_1}$$

Interpolación de Newton.

General.

- Gráficamente el cálculo de las diferencias finitas muestra un comportamiento recursivo.



Interpolación de Newton.
General.

- La forma general del polinomio de interpolación de Newton, teniendo en cuenta lo expresado anteriormente es la siguiente

$$\begin{aligned} f_m(x) = f(x_1) + f[x_2, x_1](x - x_1) + \\ f[x_3, x_2, x_1](x - x_1)(x - x_2) + \\ f[x_{m+1}, x_m, ..., x_2, x_1](x - x_1)(x - x_2)...(x - x_m) \end{aligned}$$

Interpolación de Newton.
General.

- **Problema:** Estimar el logaritmo natural de 2 empleando un polinomio de interpolación de Newton de orden tres a partir de los siguientes puntos

$$
\begin{aligned}
x_1 &= 1, f(x_1) = 0 \\
x_2 &= 4, f(x_2) = 1.386294 \\
x_3 &= 6, f(x_3) = 1.791759 \\
x_4 &= 5, f(x_4) = 1.609438
\end{aligned}
$$

Nota: Encuentre la solución construyendo la tabla de las diferencias

Interpolación de Newton.

General.

- **Solución:**

Primeras Diferencias

$$f[x_2, x_1] = \frac{1.386294 - 0}{4 - 1} = 0.4620981$$

$$f[x_3, x_2] = \frac{1.791759 - 1.386294}{6 - 4} = 0.2027326$$

$$f[x_4, x_3] = \frac{1,609438 - 1.791759}{5 - 6} = 0.1823216$$

Interpolación de Newton.

General.

Segundas Diferencias

$$f[x_3, x_2, x_1] = \frac{0.2027326 - 0.4620981}{6 - 1} = -0.05187311$$
$$f[x_4, x_3, x_2] = \frac{0.1823216 - 0.2027326}{5 - 4} = -0.02041100$$

Interpolación de Newton.
General.

Terceras Diferencias

$$f[x_4, x_3, x_2, x_1] = \frac{-0.02041100 - (-0.05187311)}{5 - 1} = 0.007865529$$

Interpolación de Newton.

General.

x_i	$f(x_i)$	First	Second	Third
1	0	0.4620981	−0.05187311	0.007865529
4	1.386294	0.2027326	−0.02041100	
6	1.791759	0.1823216		
5	1.609438			

$$f_3(x) = b_1 + b_2(x - x_1) + b_3(x - x_1)(x - x_2) + b_4(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)$$

$$f_3(x) = 0 + 0.4620981(x - 1) - 0.05187311(x - 1)(x - 4) + 0.007865529(x - 1)(x - 4)(x - 6)$$

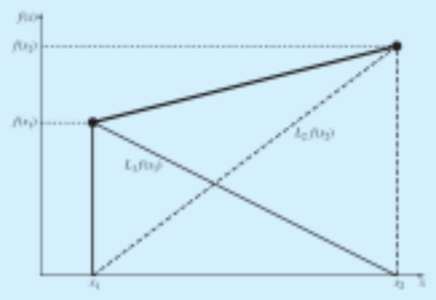
Interpolación de Lagrange.
Introducción.

Un polinomio de interpolación lineal se puede expresar de la forma

$$f(x) = L_1 f(x_1) + L_2 f(x_2)$$

L_1 y L_2 son coeficientes de ponderación

$$L_1 = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}$$
$$L_2 = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$



Interpolación de Lagrange.
Lineal.

- A partir de las ecuaciones anteriores se obtiene el polinomio de interpolación de Lagrange de primer orden

$$f_1(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} f(x_1) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(x_2)$$

Interpolación de Lagrange.
Cuadrática.

- A partir de tres puntos se puede encontrar un polinomio de interpolación de Lagrange de segundo orden (parábola)
- Para este caso la suma de tres parábolas resulta en la parábola única que une los tres puntos.

$$f_2(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f(x_1) + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f(x_2) + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f(x_3)$$

Interpolación de Lagrange.
General.

- La forma general del polinomio de interpolación de Lagrange, es la siguiente

$$f_m(x) = \sum_{i=1}^{m+1} L_i(x) f(x_i)$$

- Los coeficientes se encuentran de la siguiente manera

$$L_i(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{m+1} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Interpolación de Lagrange.

General.

- **Problema:** Use un polinomio de interpolación de Lagrange de primer y segundo orden para evaluar un valor de densidad cuando $x = 15$ grados centígrados

$$\begin{aligned} x_1 &= 0, f(x_1) = 3.85 \\ x_2 &= 20, f(x_2) = 0.800 \\ x_3 &= 40, f(x_3) = 0.212 \end{aligned}$$

Interpolación de Lagrange.
General.

- **Solución:**

Polinomio de Lagrange de primer orden

$$f_1(x) = \frac{15-20}{0-20}3.85 + \frac{15-0}{20-0}0.800 = 1.5625$$

Interpolación de Lagrange.

General.

Polinomio de Lagrange de segundo orden

$$f_2(x) = \frac{(15-20)(15-40)}{(0-20)(0-40)}3.85 + \frac{(15-0)(15-40)}{(20-0)(20-40)}0.800 + \frac{(15-0)(15-20)}{(40-0)(40-20)}0.212 = 1.3316875$$

Problemas I

- **Problema:** Realizar una función en scilab que permita aplicar el método de regresión lineal por mínimos cuadrados. La función debe recibir los valores de x, y y debe retornar en un vector el valor de la pendiente y el intercepto $[a_1, a_0]$ y en otra variable el valor del coeficiente de determinación r^2

Problemas I

- **Problema:** Realizar una función en scilab que permita aplicar el método de interpolación de Newton. La función debe recibir los valores de x, y y un valor en el cual el polinomio de interpolación es evaluado. Se debe retornar el valor interpolado

Problemas I

- **Problema:** Realizar una función en scilab que permita aplicar el método de interpolación de Lagrange. La función debe recibir los valores de x, y y un valor en el cual el polinomio de interpolación es evaluado. Se debe retornar el valor interpolado

Bibliografía I

S. Chapra.
Applied Numerical Methods with MATLAB For Engineers and Scientists, Sixth Edition.
Mac Graw Hill, 2010.