Tutoría 5
Física Computacional I
Grado en Física

Javier Carrasco Serrano, javcarrasco@madrid.uned.es

Repaso funciones

- Única expresión:

$$\text{“nombre de la función”}\left(\begin{array}{c}\text{lista de argumentos}\\\text{separados por comas}\end{array}\right) := \begin{array}{c}\text{expresión que}\\\text{define la función}\end{array};$$

- Varias expresiones:

$$\text{“nombre de la función”}\left(\begin{array}{c}\text{lista de}\\\text{argumentos}\\\text{separados}\\\text{por comas}\end{array}\right) := \texttt{block}\left(\left[\begin{array}{c}\text{lista de}\\\textit{variables}\\\textit{locales}\\\text{separadas}\\\text{por comas}\end{array}\right], \begin{array}{c}\text{lista de}\\\text{expresiones}\\\text{necesarias}\\\text{para definir}\\\text{la función}\\\text{separadas}\\\text{por comas,}\\\texttt{return}(\text{expre-}\\\text{sión retorna-}\\\text{da por la}\\\text{función})\end{array}\right);$$

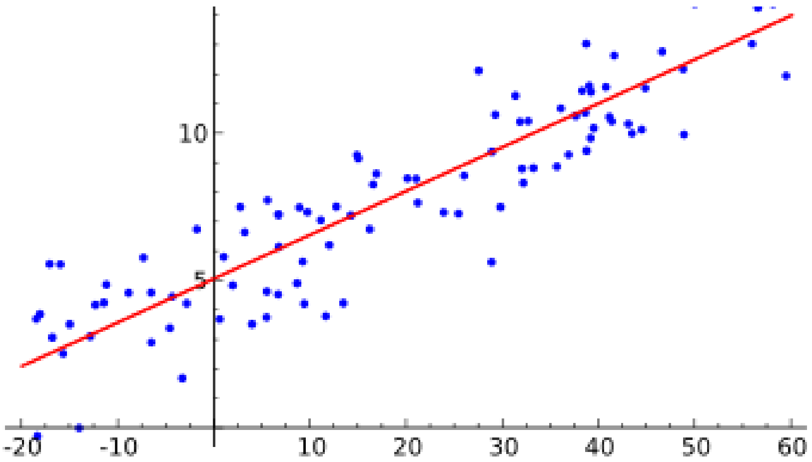
Tema 7:
Ajustes

07

Introducción

- Observaciones (x_i, y_i), por ejemplo observaciones o mediciones en un laboratorio, que se intentan ajustar mediante una función, para que permita poder hacer cálculos sobre ella (inferencia de otros valores, derivadas, integrales…).
- Conjunto de datos + modelo matemático → ajuste mínimos cuadrados (regresión lineal, logística…).

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$$



$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum x \sum y - n \sum xy}{\left(\sum x\right)^2 - n \sum x^2} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2}$$

$$\hat{\beta}_0 = \frac{\sum y - \hat{\beta}_1 \sum x}{n} = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

- “Econometría” de D. C. Porter y D. M. Gujarati
- https://es.wikipedia.org/wiki/Regresi%C3%B3n_lineal

Funciones de ajustes en Maxima

- Regresión método mínimos cuadrados ordinarios: *lsquares_estimates (datos, variable, modelo, parámetros);*
  - → Necesita cargar la librería lsquares: comando *load("lsquares");*
  - → En "datos" necesitamos meter una matriz de la forma *M:matrix([x1, y1], [x2, y2], . . . [xN, yN]));*
  - → "variable" es la variable independiente del modelo, a partir de la que vamos a estimar la otra (en general, será *x*).
  - → En "modelo" se suministra la forma que queremos que tenga el modelo: lineal *(a*x+b),* polinómica grado 2 (*a2*x^2+a1*x+b*), logística (),…
  - → En "parámetros" metemos los parámetros a estimar (*a,b; a1,a2,b*).

7.2. Funciones de Maxima que debemos usar

- *data: read_nested_list(concat(path,filename))$*

  → Lee el fichero de datos y lo guarda en la variable *data.*

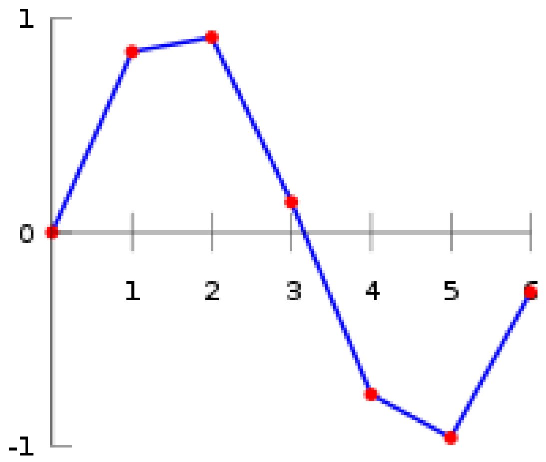
- *apply(matrix,data);*

  → Convierte los datos, que se cargan como una lista, en una matriz / tabla que sí que pueden usar las funciones de regresión e interpolación (interpolación acepta listas o matrices).

- *plot2d(función, [variable, lim_inf, lim_sup], opciones);*
  - *wxplot2d(…);*
  - *draw2d(…);*

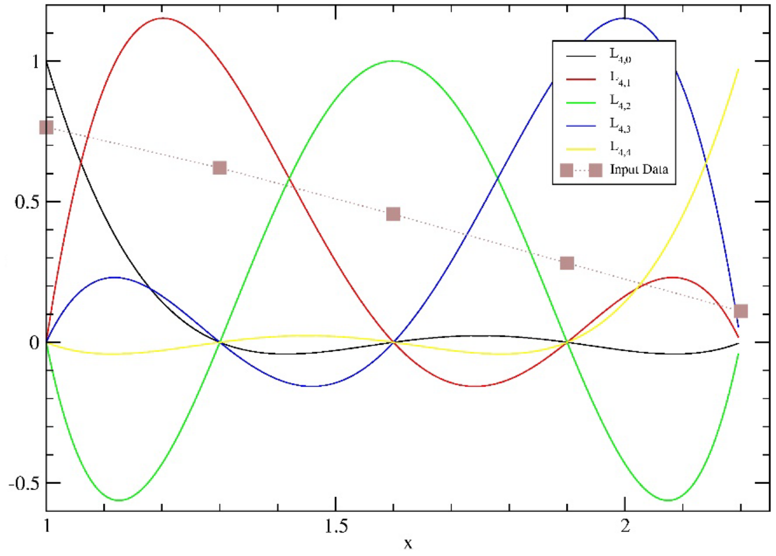
Introducción

- Si no se cumplen hipótesis regresiones → interpolación: lineal, Lagrange (polinómica), splines.
  → extrapolación cuando se calculan los valores fuera de las observaciones.



$$y = y_a + (x - x_a)\frac{(y_b - y_a)}{(x_b - x_a)}$$

$$L(x) = \sum_{j=0}^{k} y_j \ell_j(x)$$



$$\ell_j(x) = \prod_{i=0,\, i\neq j}^{k} \frac{x - x_i}{x_j - x_i} = \frac{x - x_0}{x_j - x_0} \cdots \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} \cdots \frac{x - x_k}{x_j - x_k}$$

- ”Métodos Numéricos. Teoría, problemas y prácticas con MATLAB”, J. A. Infante y J. M. Rey.
- Interpolación lineal: https://es.wikipedia.org/wiki/Interpolaci%C3%B3n
- Interpol. polinómica: https://es.wikipedia.org/wiki/Interpolaci%C3%B3n_polin%C3%B3mica_de_Lagrange

Funciones de ajustes en Maxima

- Interpolación lineal: *linearinterpol(datos);*
  → Necesita cargar la librería lsquares: comando *load(“lsquares”);*

- Interpolación polinómica (Lagrange): *lagrange(datos);*
  → Necesita cargar la librería interpol: comando *load(“interpol”);*

- Interpolación por splines (cúbicas): *cspline(datos);*
  → Necesita cargar la librería interpol: comando *load(“interpol”);*
  → son funciones definidas a trozos, y cada trozo es un polinomio de grado 3.
  → https://es.wikipedia.org/wiki/Spline#Interpolaci%C3%B3n_Segmentaria_C%C3%BAbica

- La <u>salida</u> de estos comandos es una <u>función</u> que regresa o ajusta.

7.1. De datos aislados a funciones

- A partir de observaciones (x_i, y_i) obtenidas en un experimento queremos encontrar una función matemática que las defina o aproxime.
  - → Predecir valores: inferencia estadística en regresiones, extrapolación en interpolaciones.
  - → Realizar operaciones sobre estas funciones: derivar e integrar.

- Interpolaciones: definidas a trozos (locales) y dadas por un polinomio (globales).
  - → Inconveniente a trozos: no es derivable.
  - → Solución: utilizar splines cúbicos (se ajuta de tal modo que la función completa es 2 veces derivable).
  - → Problemas fuera del intervalo en el que se ha construido la interpolación.
  - → Problemas si los datos oscilan mucho.
  - → Muchos errores para predicción.
- Regresiones: minimizan el error cuadrático

7.1. De datos aislados a funciones

- Regresiones:
  - → minimizan el error cuadrático.
  - → se asume una forma funcional: $y = a + bx^c, y = ae^{bx}, y = ax^b$
  - → para elegir la forma funcional, representamos observaciones del siguiente modo: $(x, y), (x, \ln(y)), (\ln(x), \ln(y))$
  - → otras formas funcionales más complicadas de detectar: $y = y_0 + ax^b, y = ae^{bx^c}, \dots$
    - → se pueden resolver mediante modelos más complicados: modelos de *machine learning* (fuera del contenido de la asignatura, muy populares recientemente por la capacidad de procesar grandes cantidades de datos).
    - → https://es.wikipedia.org/wiki/Aprendizaje_autom%C3%A1tico

7.3. Problemas resueltos

Adobe Acrobat
Document

C:\Users\n87625\
ments\Javier\uned

C:\Users\n87625\
ments\Javier\uned

C:\Users\n87625\
ments\Javier\uned

Ejercicio 1

Dadas las colecciones de puntos experimentales con la forma (x_i, y_i) que puede encontrar en la página web de la asignatura, realice las correspondientes interpolaciones.

Ejercicio 2

A la vista de las anteriores interpolaciones formule un modelo matemático aproximado y realice el correspondiente ajuste por mínimos cuadrados.

Ejercicio 3

Visualice los resultados usando `plot2d`.

Gracias!