

AJUSTES DE CURVAS

Método de Regresión Exponencial

Curvas de tipo $y = ae^{bx}$ y $y = e^{a+bx}$

Ing. Yamil Armando Cerquera¹
Esp Sistemas U. Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería
Universidad Surcolombiana

CONTENIDO

Desarrollo del modelo.....	2
Exponencial del tipo $y = Ae^{Bx}$	4
Ejemplo aplicado a ingeniería.....	6
Cinética de una reacción	6
Exponencial del tipo $y = e^{a+bx}$	11
Cómo proponer la curva a ajustar?	12
Ejemplo prácticos.....	12
Cinética de una reacción	12
Aproximación de una función matemática complicada.....	17
Pronósticos del número de lectores de Superman	19
Resumen	20
RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS	22
Bibliografía Básica:.....	22
Bibliografía Complementaria:	22
Bibliografía OnLine:	23

¹ Docente de planta. Universidad Surcolombiana. Escalafón Asociado. Programa Ingeniería Electrónica

Preámbulo

A lo largo de la profesión de un ingeniero, un físico, un matemático, frecuentemente se presentan ocasiones en las que deben ajustar curvas a un conjunto de datos representados por puntos. Las técnicas desarrolladas para este fin pueden dividirse en dos categorías generales: interpolación y regresión. Se considerará aquí la primera de estas dos categorías. Más aún, como la teoría de aproximación exponencial es una de las técnicas utilizadas, será la que se considere en este trabajo.

Cuando se asocia un error sustancial a los datos, la interpolación exponencial es inapropiada y puede llevar a resultados no satisfactorios cuando se usa para predecir valores intermedios. Los datos experimentales a menudo son de ese tipo. Una estrategia más apropiada en estos casos es la de obtener una función aproximada que ajuste “adecuadamente” el comportamiento o la tendencia general de los datos, sin coincidir necesariamente con cada punto en particular.

Una curva exponencial puede usarse en la caracterización de la tendencia de los datos sin pasar sobre ningún punto en particular. Una manera de determinar la curva, es inspeccionar de manera visual los datos graficados y luego trazar la “mejor” curva a través de los puntos. Aunque este enfoque recurre al sentido común y es válido para cálculos a “simple vista” es deficiente ya que es arbitrario. Es decir, cada analista trazará curvas diferentes.

La manera de quitar esta subjetividad es considerar un criterio que cuantifique la suficiencia del ajuste. Una forma de hacerlo es obtener una curva que minimice la diferencia entre los datos y la curva y el método para llevar a cabo este objetivo es al que se le llama *regresión exponencial*.

Introducción

El presente trabajo forma parte de los objetivos y contenidos de aprendizaje de la cátedra MÉTODOS NUMÉRICOS, que pretende desarrollar las habilidades para la utilización de los métodos lineales y estimación de mínimos cuadrados.

En este trabajo básicamente se habla de cómo desarrollar la aplicación de los métodos lineales y estimación por mínimos cuadrados, además de inferencia, predicción y correlación para ajustar datos a curvas de tipos $y = ae^{bx}$ y $y = e^{a+bx}$.

Se desarrollan una serie de ejemplos mediante los cuales se trata de presentar la manera más sencilla de usar estos métodos.

Si se sabe que existe una relación entre una variable denominada dependiente y otras denominadas independientes (como por ejemplo las existentes entre: la experiencia profesional de los trabajadores y sus respectivos sueldos, las estaturas y pesos de personas, la producción agraria y la cantidad de fertilizantes utilizados, etc.), puede

darse el problema de que la dependiente asuma múltiples valores para una combinación de valores de las independientes.

La dependencia a la que hace referencia es relacional matemática y no necesariamente de causalidad. Así, para un mismo número de unidades producidas, pueden existir niveles de costo, que varían empresa a empresa.

Si se da ese tipo de relaciones, se suele recurrir a los estudios de regresión en los cuales se obtiene una nueva relación pero de un tipo especial denominado función, en la cual la variable independiente se asocia con un indicador de tendencia central de la variable dependiente. Cabe recordar que en términos generales, una función es un tipo de relación en la cual para cada valor de la variable independiente le corresponde uno y sólo un valor de la variable dependiente.

Objetivos

Entre los objetivos propuestos en este apartado se puede citar los siguientes:

1. Que sea fácilmente comprensible para los alumnos con un conocimiento mínimo de matemáticas;
2. Capacitar a los alumnos para que practiquen los métodos numéricos en una computadora;
3. Elaborar programas simples que puedan usarse de manera sencilla en aplicaciones científicas;
4. Proporcionar software que resulte fácil de comprender.

La importancia de los métodos numéricos ha aumentado de forma drástica en la enseñanza de la ingeniería y la ciencia, lo cual refleja el uso actual y sin precedentes de las computadoras.

El desarrollo de un programa siempre es importante en el aprendizaje de métodos numéricos. La presentación de resultados calculados con gráficos utilizando algún software, por ejemplo MATLAB, motiva a los alumnos para aprender métodos matemáticos y numéricos que de otra forma podrían resultar tediosos.

Desarrollo del modelo

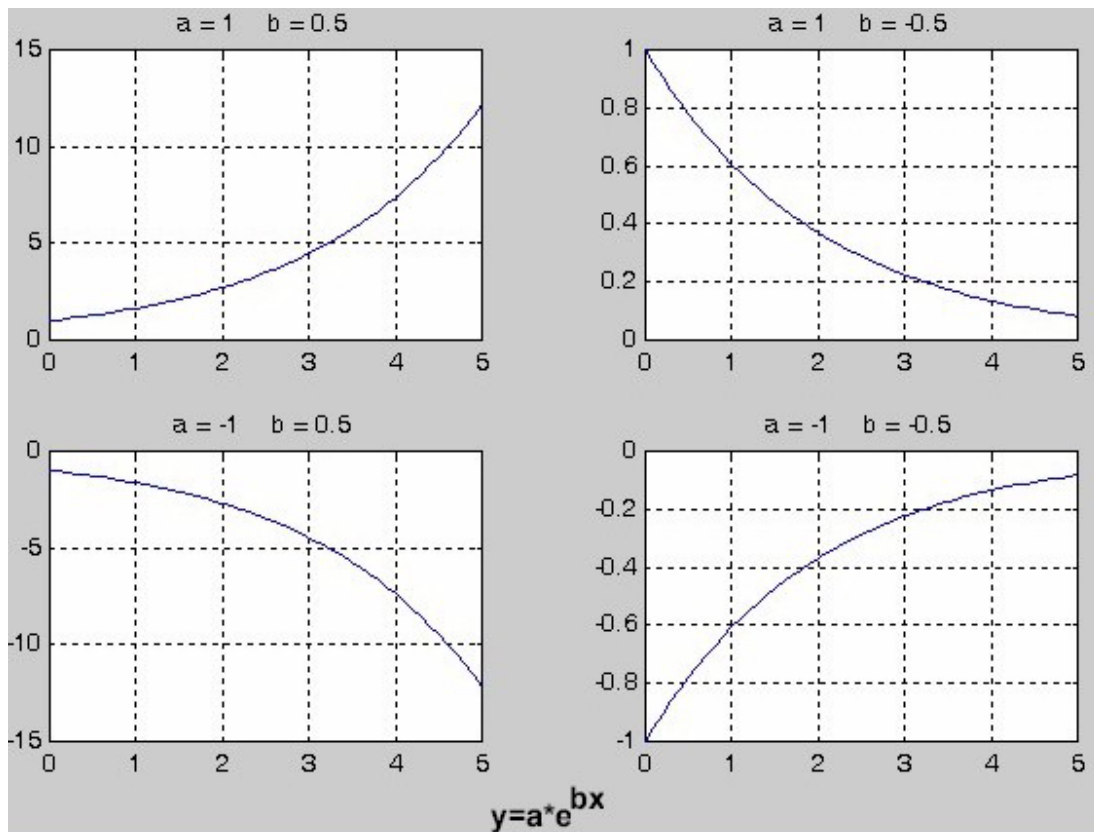
En el caso de que la esperanza propia de cada medición siga un modelo de la forma

$y = Ae^{Bx}$, la expresión a minimizar se reduce a $S(A, B) = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - Ae^{Bx_i})^2}{\sigma_{y_i}^2}$, La minimización

de $S(A, B)$ es un problema sin solución analítica, por esto mismo se debe realizar a través de métodos numéricos;

Desafortunadamente en la práctica no siempre los polinomios ajustan bien una serie de datos. Una curva que aparece frecuentemente en la práctica es la exponencial, la cual es:

Exponencial del tipo $y = Ae^{Bx}$



Si se les aplica el método de mínimos cuadrados se obtiene las dos curvas propuestas así:

$$y_p = Ae^{Bx}$$

S^2 Está dada por:

$$S^2 = \sum (y_i - Ae^{Bx_i})^2$$

Derivando

$$\frac{\partial S^2}{\partial A} \equiv \frac{\partial}{\partial A} \sum (y_i - Ae^{Bx_i})^2 = 2 \sum (y_i - Ae^{Bx_i})(-e^{Bx_i})$$

$$\frac{\partial S^2}{\partial B} \equiv \frac{\partial}{\partial B} \sum (y_i - Ae^{Bx_i})^2 = 2 \sum (y_i - Ae^{Bx_i})(-Ae^{Bx_i} x_i)$$

Igualando a 0 y simplificando

$$\frac{\partial S^2}{\partial A} = 2 \sum (y_i - Ae^{Bx_i})(-e^{Bx_i}) = 0 \Rightarrow \sum Ae^{2Bx_i} = \sum y_i e^{Bx_i}$$

$$\frac{\partial S^2}{\partial B} = 2 \sum (y_i - Ae^{Bx_i})(-Ae^{Bx_i} x_i) = 0 \Rightarrow \sum Ae^{2Bx_i} x_i = \sum y_i e^{Bx_i} x_i$$

Se puede observar que las ecuaciones normales son no lineales, por lo cual son difíciles de resolver. Por esta razón en la práctica se prefiere usar un cambio de variable antes de aplicar el método de mínimos cuadrados.

Si para el modelo exponencial se toman logaritmos naturales se tiene:

$$y = ae^{bx}$$

$$\ln(y) = \ln(a) + bx$$

Si

$$z = \ln(y)$$

$$a_0 = \ln(a)$$

$$a_1 = b$$

y se obtiene:

$$z = a_0 + a_1 x$$

La ecuación de una recta, la cual es trivial hallarla por mínimos cuadrados.

Para el error estándar cuadrado es

$$\sigma_{xy} = \sqrt{\frac{S^2}{M-2}}$$

Es importante regresar a las variables originales, después de haber hecho la regresión, ya que interesa el ajuste de y en función de x , no de $\ln(y)$ en función de x ó de $\ln(y)$ en función de $\ln(x)$.

En ambos casos

$$A = e^{a_0}$$

$$B = a_1$$

S^2 Se calcula con la expresión respectiva del paso 2.

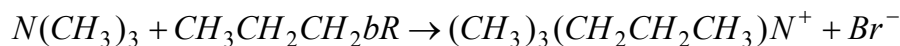
Ejemplo aplicado a ingeniería

A continuación se muestran algunas aplicaciones del ajuste de curvas.

Cinética de una reacción

En la industria química se elaboran productos que son de uso diario: lociones, jabones, perfumes, desodorantes, dulces, etc, etc, etc. Muchos de estos productos son sintéticos y se elaboran en equipos llamados reactores. Para diseñar y posteriormente construir un reactor se requiere información de como varia la concentración en función del tiempo de una reacción química determinada. Esta información es denominada cinética de la reacción. Para determinar dicha cinética se requiere medir en laboratorio datos de la concentración de algún reactivo para varios tiempos de reacción.

La trimetilamina y el bromuro de n-propilo es una reacción que se puede estudiar para diseñar reactores. La reacción es:



A continuación se muestra una tabla de la concentración de la trimetilamina en función del tiempo

Tabla 4 Concentración de trimetilamina en función del tiempo

t(min)	C(mol/l)
13	0.0888
34	0.0743
59	0.0633
120	0.0448

Para proponer el modelo apropiado se recurre a la teoría. La Fisicoquímica da la teoría necesaria. De acuerdo a la Fisicoquímica 2 modelos posibles en este caso son

$$C = Ae^{kt} \quad \text{Modelo 1}$$

$$C = \frac{1}{kt + A} \quad \text{Modelo 2}$$

Para el modelo 1

```
t=[13 34 59 120];
c=[0.0888 0.0743 0.0633 0.0448];
plot(t,c,'or')
axis([0 120 0 0.1])
A=0.09366307630583030;
```

```

k=-0.00625763329386314;
T=1:3:120;
C=A.*exp(k*T);
hold on
plot(T,C)

```

Se prueba ambos modelos para ver cual es más apropiado. Para el modelo exponencial $C = Ae^{kt}$ se hace un cambio de variable

$$C = Ae^{kt}$$

$$\ln(C) = \ln(A) + kt$$

Si se utiliza la siguiente nomenclatura

$$y = \ln(C)$$

$$a_0 = \ln(A)$$

$$a_1 = k$$

$$x = t$$

Se obtiene la ecuación

$$y = a_0 + a_1x$$

En estos términos las ecuaciones normales son

$$\begin{bmatrix} M & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum yx \end{bmatrix}$$

O si lo prefiere

$$\begin{bmatrix} M & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \ln(C) \\ \sum t \ln(C) \end{bmatrix}$$

M	t(min)=x	$x^2 = t^2$	C(mol/l)	$\ln(C) = y$
1	13	169	0.0888	-2,421368628984012672056928546409
2	34	1156	0.0743	-2,5996443272584235712133469791029
3	59	3481	0.0633	-2,7598699498320065489347643163607
4	120	14400	0.0448	-3,1055471395611975744632203465452
$\sum 4$	226	19206		-10,886430045635640366668260188418

Calculando las sumatorias

$$M = 4$$

$$\sum x = \sum t = 226$$

$$\sum x^2 = \sum t^2 = 19206$$

$$\sum y = \sum \ln(C) = -10.8864300456356$$

$$\sum xy = \sum t \ln(C) = -655.363683091011$$

Las ecuaciones son

$$\begin{bmatrix} 4 & 226 \\ 226 & 19206 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -10.8864300456356 \\ -655.363683091011 \end{bmatrix}$$

$$4a_0 + 226a_1 = -10.8864300456356$$

$$226a_0 + 1920a_1 = -655.363683091011$$

Resolviendo

$$a = \begin{bmatrix} -2.36805123030564 \\ -6.257633293863140E-03 \end{bmatrix}$$

Regresando a la variable original

$$A = e^{a_0} = e^{-2.36805123030564} = 9.366307630583030E-02$$

$$k = -6.257633293863140E-03$$

La ecuación es

Si $C = Ae^{kt}$ entonces;

$$C = 9.366307630583030E-02 e^{-6.257633293863140E-03t}$$

$$C = 0.09366307630583030 e^{-0.006257633293863140t}$$

El error estándar cuadrado es

$$\sigma_{tC} = \sqrt{\frac{S^2}{M-2}} = \sqrt{\frac{1.047430671204260E-05}{4-2}} = 2.288482762884900E-03$$

Para el segundo modelo (Potencial²) también se realiza cambios de variable

$$C = \frac{1}{kt + A}$$

$$\frac{1}{C} = kt + A$$

Si

² Este modelo se desarrolla aparte como modelo de regresión potencial

$$y = \frac{1}{c}$$

$$k = a_1$$

$$A = a_0$$

$$t = x$$

Se obtiene

$$y = a_0 + a_1x$$

Las ecuaciones normales son

$$\begin{bmatrix} M & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum yx \end{bmatrix}$$

O si prefiere

$$\begin{bmatrix} M & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \frac{1}{c} \\ \sum \frac{t}{c} \end{bmatrix}$$

Calculando las sumatorias que faltan

$$\sum y = \sum \frac{1}{c} = 62.8394283442109$$

$$\sum xy = \sum \frac{1}{c} = 4214.64164210046$$

Las ecuaciones son

$$\begin{bmatrix} 4 & 226 \\ 226 & 19206 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 62.8394283442109 \\ 4214.64164210046 \end{bmatrix}$$

$$4a_0 + 226a_1 = 62.8394283442109$$

$$226a_0 + 19206a_1 = 4214.64164210046$$

Resolviendo

$$a = \begin{bmatrix} 9.879798841790472 \\ 1.031868790822660E - 01 \end{bmatrix}$$

Regresando a la variable original

$$A = 9.879798841790472$$

$$k = 1.031868790822660E - 01$$

La ecuación es

$$C = \frac{1}{1.031868790822660E - 01 t + 9.87979841790472}$$

El error estándar cuadrado es

$$\sigma_{tC} = \sqrt{\frac{S^2}{M-2}} = \sqrt{\frac{0.0000002232941073824}{4-2}} = 6.013709784245E - 04$$

Se puede observar que el modelo 2 es mejor al modelo exponencial ya que su error estándar cuadrado es menor. Por esta razón se acepta que la curva ajustada es:

$$C = \frac{1}{1.031868790822660E - 01 t + 9.87979841790472}$$

Este modelo de acuerdo a su error estándar cuadrado da 3 decimales correctos o sea en este caso 2 cifras significativas. Con esto en mente se determina cual es la concentración inicial al principio del experimento. Esto equivale a evaluar el modelo en $t=0$ min.

$$C(0 \text{ min}) = \frac{1}{9.87979841790472}$$

$$C(0 \text{ min}) = 0.1012166400266 \text{ mol/l}$$

$$C(0 \text{ min}) = 0.1 \text{ mol/l}$$

¿Cuánto reactivo queda a la media hora de iniciado el experimento?

$$C(30 \text{ min}) = \frac{1}{1.031868790822660E - 01 * (30) + 9.87979841790472}$$

$$C(30 \text{ min}) = 0.07706888657084 \text{ mol/l}$$

$$C(30 \text{ min}) = 0.077 \text{ mol/l}$$

¿Cuánto reactivo queda a las 3 horas de iniciado el experimento?

$$C(180 \text{ min}) = \frac{1}{1.031868790822660E - 01 * (180) + 9.87979841790472}$$

$$C(180 \text{ min}) = 0.03537163913639 \text{ mol/l}$$

$$C(180 \text{ min}) = 0.035 \text{ mol/l}$$

De los resultados anteriores en orden de confiabilidad tenemos: $C(30 \text{ min})$, $C(0 \text{ min})$, $C(180 \text{ min})$. Esto es porque en 30 minutos se esta interpolando. En los otros 2 valores se realizan extrapolaciones y como ya mencionamos anteriormente es mas seguro interpolar que extrapolar. La concentración en 0 min es mas confiable que la

concentración en 180 min porque esta mas cerca del intervalo de tiempos que cubre la tabla.

Por ultimo las unidades de las constantes del modelo son:

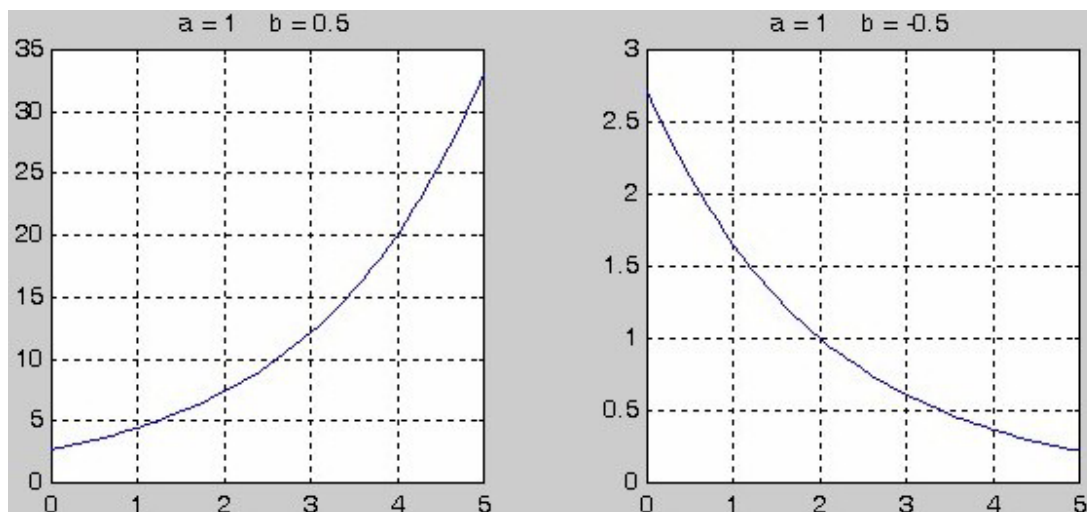
$$A[=]\text{mol/lt}$$

$$k[=]\text{mol/lt/min}$$

Esto es porque el modelo debe de ser dimensionalmente consistente.

Exponencial del tipo $y = e^{a+bx}$

En determinados experimentos, en su mayoría biológicos, la dependencia entre las variables X e Y es de forma exponencial, en cuyo caso interesa ajustar a la nube de puntos una función del tipo: $y = e^{a+bx}$ con una transformación de linealidad, tomando logaritmos neperianos, se convierte el problema en una cuestión de regresión lineal. Es decir:



Aplicando logaritmos neperianos: $\ln(y) = a + bx$

Llamando $y = \ln(y)$, se tiene $y = a + bx$ (regresión lineal)

Para simplificar, descartando multiplicidades y suponiendo que cada par se repite una sola vez, las ecuaciones normales serán:

$$\left\{ \begin{array}{l} aN + b\sum_i x_i = \sum_i \ln(y_i) \\ a\sum_i x_i + b\sum_i x_i^2 = \sum_i x_i \ln(y_i) \end{array} \right\}$$

Calculando los parámetros 'a' y 'b', se tiene la ecuación de la función exponencial:

$$y = e^{a+bx}$$

Cómo proponer la curva a ajustar?

La curva propuesta puede determinarse de las siguientes maneras:

Considerando la teoría. A veces la naturaleza física de los datos nos dice o al menos propone la forma de la curva. Por ejemplo si se ajusta datos de voltaje contra corriente la ecuación apropiada es lineal por la ley del Ohm.

Graficando. Si no tiene una teoría que indique la forma de la curva, viendo la gráfica se puede hacer una idea del mejor ajuste.

Por tanteo. Probando diversas curvas, la que nos de σ_{xy} mas pequeño será la apropiada.

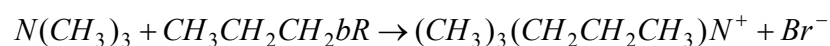
Ejemplo prácticos

A continuación mostramos algunas aplicaciones del ajuste de curvas.

Cinética de una reacción

En la industria química se elaboran productos que usamos todos los días: lociones, jabones, perfumes, desodorantes, dulces, etc. Muchos de estos productos son sintéticos y se elaboran en equipos llamados reactores. Para diseñar y posteriormente construir un reactor se requieren información de como varia la concentración en función del tiempo de una reacción química determinada. Esta información es denominada cinética de la reacción. Para determinar dicha cinética se requiere medir en laboratorio datos de la concentración de algún reactivo¹³ para varios tiempos de reacción.

La trimetilamina y el bromuro de n-propilo es una reacción que se puede estudiar para diseñar reactores. La reacción es:



A continuación se muestra una tabla de la concentración de la trimetilamina en función del tiempo

Tabla 4 Concentración de trimetilamina en función del tiempo

t (min)	C (mol/l)
1.30000000000000E+01	8.88000000000000E-02
3.40000000000000E+01	7.43000000000000E-02
5.90000000000000E+01	6.33000000000000E-02
1.20000000000000E+02	4.48000000000000E-02

Para proponer el modelo apropiado recurramos a la teoría. La Físicoquímica nos da la teoría necesaria. De acuerdo a la Físicoquímica 2 modelos posibles en este caso son

$$C = Ae^{kt} \quad \text{Modelo 1}$$

$$C = \frac{1}{kt + A} \quad \text{Modelo 2}$$

Se prueba ambos modelos para ver cual es más apropiado. Para el modelo exponencial $C = Ae^{kt}$ se hace un cambio de variable

$$C = Ae^{kt}$$

$$\ln(C) = \ln(A) + kt$$

Si se utiliza la siguiente nomenclatura

$$y = \ln(C)$$

$$a_0 = \ln(A)$$

$$a_1 = k$$

$$x = t$$

Se obtiene la ecuación

$$y = a_0 + a_1x$$

En estos términos las ecuaciones normales son

$$\begin{bmatrix} M & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum yx \end{bmatrix}$$

O si lo prefiere

$$\begin{bmatrix} M & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \ln(C) \\ \sum t \ln(C) \end{bmatrix}$$

M	t(min)=x	$x^2 = t^2$	C(mol/l)	$\ln(C) = y$
1	13	169	0.0888	-2,421368628984012672056928546409
2	34	1156	0.0743	-2,5996443272584235712133469791029

3	59	3481	0.0633	-2,7598699498320065489347643163607
4	120	14400	0.0448	-3,1055471395611975744632203465452
$\sum 4$	226	19206		-10,886430045635640366668260188418

Calculando las sumatorias

$$\begin{aligned}
 M &= 4 \\
 \sum x &= \sum t = 226 \\
 \sum x^2 &= \sum t^2 = 19206 \\
 \sum y &= \sum \ln(C) = -10.8864300456356 \\
 \sum xy &= \sum t \ln(C) = -655.363683091011
 \end{aligned}$$

Las ecuaciones son

$$\begin{bmatrix} 4 & 226 \\ 226 & 19206 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -10.8864300456356 \\ -655.363683091011 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
 4a_0 + 226a_1 &= -10.8864300456356 \\
 226a_0 + 1920a_1 &= -655.363683091011
 \end{aligned}$$

Resolviendo

$$a = \begin{bmatrix} -2.36805123030564 \\ -6.257633293863140E-03 \end{bmatrix}$$

Regresando a la variable original

$$\begin{aligned}
 A = e^{a_0} &= e^{-2.36805123030564} = 9.366307630583030E-02 \\
 k &= -6.257633293863140E-03
 \end{aligned}$$

La ecuación es

Si $C = Ae^{kt}$ entonces;

$$C = 9.366307630583030E-02 e^{-6.257633293863140E-03t}$$

$$C = 0.09366307630583030 e^{-0.006257633293863140t}$$

El error estándar cuadrado es

$$\sigma_{tC} = \sqrt{\frac{S^2}{M-2}} = \sqrt{\frac{1.047430671204260E-05}{4-2}} = 2.288482762884900E-03$$

Para el segundo modelo también se realiza cambios de variable

$$C = \frac{1}{kt + A}$$

$$\frac{1}{C} = kt + A$$

Si

$$y = \frac{1}{C}$$

$$k = a_1$$

$$A = a_0$$

$$t = x$$

Se obtiene

$$y = a_0 + a_1x$$

Las ecuaciones normales son

$$\begin{bmatrix} M & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum yx \end{bmatrix}$$

O si prefiere

$$\begin{bmatrix} M & \sum t \\ \sum t & \sum t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum \frac{1}{c} \\ \sum \frac{t}{c} \end{bmatrix}$$

Calculando las sumatorias que faltan

$$\sum y = \sum \frac{1}{c} = 62.8394283442109$$

$$\sum xy = \sum \frac{t}{c} = 4214.64164210046$$

Las ecuaciones son

$$\begin{bmatrix} 4 & 226 \\ 226 & 19206 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 62.8394283442109 \\ 4214.64164210046 \end{bmatrix}$$

$$4a_0 + 226a_1 = 62.8394283442109$$

$$226a_0 + 19206a_1 = 4214.64164210046$$

Resolviendo

$$a = \begin{bmatrix} 9.879798841790472 \\ 1.031868790822660E - 01 \end{bmatrix}$$

Regresando a la variable original

$$A=9.87979841790472$$

$$k=1.031868790822660E-01$$

La ecuación es

$$C = \frac{1}{1.031868790822660E-01 t + 9.87979841790472}$$

El error estándar cuadrado es

$$\sigma_{tC} = \sqrt{\frac{S^2}{M-2}} = \sqrt{\frac{0.0000002232941073824}{4-2}} = 6.013709784245E-04$$

Se puede observar que el modelo 2 es mejor al modelo exponencial ya que su error estándar cuadrado es menor. Por esta razón se acepta que la curva ajustada es:

$$C = \frac{1}{1.031868790822660E-01 t + 9.87979841790472}$$

Este modelo de acuerdo a su error estándar cuadrado da 3 decimales correctos o sea en este caso 2 cifras significativas. Con esto en mente se determina cual es la concentración inicial al principio del experimento. Esto equivale a evaluar el modelo en $t=0$ min.

$$C(0 \text{ min}) = \frac{1}{9.87979841790472}$$

$$C(0 \text{ min}) = 0.1012166400266 \text{ mol/l}$$

$$C(0 \text{ min}) = 0.1 \text{ mol/l}$$

¿Cuánto reactivo queda a la media hora de iniciado el experimento?

$$C(30 \text{ min}) = \frac{1}{1.031868790822660E-01 * (30) + 9.87979841790472}$$

$$C(30 \text{ min}) = 0.07706888657084 \text{ mol/l}$$

$$C(30 \text{ min}) = 0.077 \text{ mol/l}$$

¿Cuánto reactivo queda a las 3 horas de iniciado el experimento?

$$C(180 \text{ min}) = \frac{1}{1.031868790822660E-01 * (180) + 9.87979841790472}$$

$$C(180 \text{ min}) = 0.03537163913639 \text{ mol/l}$$

$$C(180 \text{ min}) = 0.035 \text{ mol/l}$$

De los resultados anteriores en orden de confiabilidad tenemos: C(30 min), C(0 min), C(180 min). Esto es porque en 30 min. estamos interpolando. En los otros 2 valores se realizan extrapolaciones y como ya mencionamos anteriormente es mas seguro interpolar que extrapolar. La concentración en 0 min es mas confiable que la concentración en 180 min porque esta mas cerca del intervalo de tiempos que cubre la tabla.

Por ultimo las unidades de las constantes del modelo son:

$$A [=] \text{mol/l}$$

$$k [=] \text{mol/l/min}$$

Esto es porque el modelo debe de ser dimensionalmente consistente.

Aproximación de una función matemática complicada

Existen funciones matemáticas que son difíciles de evaluar. De estas funciones muchas están tabuladas en manuales de matemáticas. Es común en aplicaciones, sobre todo en programas de computadora usar una ecuación que se aproxime al comportamiento de alguna de estas funciones. Una forma de obtener una función más simple de evaluar a partir de una función complicada, consiste en generar una tabla y posteriormente hallar una curva que se ajuste a la misma.

La función Gamma ó función factorial generalizada, se emplea en la solución de algunas ecuaciones diferenciales ó en el calculo de ciertas integrales. Esta función como su nombre lo indica generaliza el concepto de factorial. Esta definida por

$$\Gamma(x) = (x-1)! = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

Como puedes ver es difícil de evaluar.

Puede demostrarse que basta con tabular esta función en el intervalo [0,1] para determinar su valor en cualquier intervalo. La tabla siguiente es un extracto de una tabla de dicha función

Tabla 5 Función Factorial

X	Y
0.0000000000000000E+00	1.0000000000000000E+00
1.0000000000000000E-01	9.513507699000000E-01
2.0000000000000000E-01	9.181687424000000E-01

3.0000000000000000E-01	8.974706963000000E-01
4.0000000000000000E-01	8.872638175000000E-01
5.0000000000000000E-01	8.862269255000000E-01
6.0000000000000000E-01	8.935153493000000E-01
7.0000000000000000E-01	9.086387329000000E-01
8.0000000000000000E-01	9.313837710000000E-01
9.0000000000000000E-01	9.617658319000000E-01
1.0000000000000000E+00	1.000000000000000E+00

La tabla original tiene 201 puntos. Con el fin de obtener una curva aproximada simple se ajustaron los datos a polinomios. La siguiente tabla muestra el error estándar cuadrado en función del grado

Tabla 6

n		nc
1	3.407921011880930E-02	1.251787073568060E-01
2	2.680405127657040E-03	1.351245089721490E-03
3	8.305981847918320E-04	1.115813123544800E-06
4	1.207116027524470E-04	6.672801758014870E-11
5	2.318866456123730E-05	2.801005330955970E-16
6	3.935621112303070E-06	8.087785268244310E-23
7	6.921022337989880E-07	1.583756736752350E-30
8	1.197875423941650E-07	2.081115955774190E-39
9	2.076761431477710E-08	1.819913769105280E-49
10	3.625215464623650E-09	1.049394671170170E-60
11	1.141214816768140E-09	3.621073490217890E-73
12	6.798503362032110E-09	8.429901698868790E-87

Se puede observar que el mejor polinomio es de grado 11, ya que tiene error estándar cuadrado mínimo. No conviene el polinomio de grado 12, ya que el error estándar cuadrado es mayor al de 11.

El polinomio de grado 11 obtenido es

$$\begin{aligned}
 y = & 9.99999992707950E - 01 - 5.77214491151253E - 01x \\
 & + 9.8013546886494E - 01x^2 - 9.068126293057010E - 01x^3 \\
 & + 9.75960153564640E - 01x^4 - 9.50895026807682E - 01x^5 \\
 & + 8.80664428706596E - 01x^6 - 7.08751938874818E - 01x^7
 \end{aligned}$$

$$+ 4.57491864732919E - 01x^8 - 2.13432637183590E - 01x^9$$

$$+ 6.246418661118020E - 02x^{10} - 8.48745000252220E - 03x^{11}$$

De acuerdo al error estándar cuadrado tenemos 8 cifras significativas. Este polinomio es más fácil de evaluar y es más recomendable que la función original, en un programa, ya que el tiempo de máquina para su evaluación es menor.

Pronósticos del número de lectores de Superman

Como mencionamos en la unidad anterior la extrapolación es menos confiable que la interpolación. Esto es principalmente por el fenómeno de oscilación. Este fenómeno es serio en los polinomios de colocación, pero no así en los polinomios de regresión. La diferencia entre ambos es que los de colocación pasan por 2 ó más puntos de la tabla, y los polinomios de regresión se *aproximan* a todos los puntos. Esto trae como consecuencia que su comportamiento sea más suave. Por esto se prefiere los polinomios de regresión para extrapolar.

En la unidad pasada en un problema se realizó la estimación de cuántos lectores potenciales tiene Superman, en base a datos del censo de USA. Los datos se dan nuevamente en la tabla 7.

Tabla 7. Censo de USA

Año	Población
1930	123203000
1940	131669000
1950	150697000
1960	179323000
1970	203212000
1980	226505000

Después de realizar diferentes ajustes el mejor polinomio es

$$y = 7.7677875657478090E + 11 + 1.971086459627230E + 09x$$

$$- 4.216781089597820E + 06x^2 + 2.355070630196930E + 03x^3$$

$$- 4.176980570680360E - 01x^4$$

con

$$\sigma_{xy} = 2.242942367069320E + 06$$

Por lo cual tenemos 3 cifras significativas.

Si repetimos la interpolación y la extrapolación de ese ejemplo tenemos

$$Y(1.9380000000000000E+03) = 1.288335516086430E+08$$
$$Y(1.9960000000000000E+03) = 2.366530072376710E+08$$

Redondeando a las cifras significativas que nos da el modelo tenemos

$$Y(1938) = 1.29E+08$$
$$Y(1996) = 2.37E+08$$

Los valores obtenidos con polinomios de colocación son respectivamente

$$Y(1938) = 1.291E+08$$
$$Y(1996) = 3E+08$$

Comparando los resultados obtuvimos mas cifras significativas con el polinomio de regresión que con el de colocación

Resumen

El ajuste de curvas ó regresión consiste en dada una tabla determinar una ecuación que se aproxime apropiadamente a los datos.

El método a utilizar se denomina mínimos cuadrados.

Consiste de los siguientes pasos:

Proponer una curva.

Formar la cantidad: $S^2 = \sum e_i^2$

Derivar parcialmente S^2 respecto de cada variable.

Igualar a 0.

Resolver las ecuaciones normales.

Calcular S^2 .

Calcular el error estándar cuadrado.

Las curvas mas usadas son los polinomios.

Para hallar el mejor polinomio se propone el grado y se va calculando el error estándar cuadrado hasta que sea menor o igual a una tolerancia, comience a subir de valor, ó se llegue al grado más alto posible.

Otras 2 curvas muy usadas son la exponencial y la potencial.

Para determinarlas se hace un cambio de variable con logaritmos y se aplica el método de mínimos cuadrados.

La curva propuesta puede determinarse considerando: Teoría, graficando ó por tanteo.

Si es necesario se debe de intentar de simplificar el modelo antes de aplicar el método de mínimos cuadrados. Si no es posible se aplica el método directamente.

El método de mínimos cuadrados NO implica necesariamente ajustar a polinomios.

RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS

Bibliografía Básica:

- ✓ MATHEUS. John H. Fink Kurtis D. Métodos Numéricos con MATLAB. Editorial Prentice Hall

Bibliografía Complementaria:

- ✓ ALTZ, Franz L. Electronic. Digital. computers: Their use in science and Engineering. 1958 Academic Press inc. New York.
- ✓ BURDEN Richard L., J. Douglas Faires; Análisis numérico. tr. Efrén Alatorre Miguel; Revisión Técnica. Ildefonso. 1998 (Biblioteca USCO. Nro Topográfico: [515 / B949a.](#))
- ✓ CHAPRA Steven C., CANALE Raymond P, Numerical Methods for engineers. McGraw Hill, Inc. 1988. 839p. ISBN 0-07-909944-0.
- ✓ CHAPRA Steven C., CANALE Raymond P. Métodos numéricos para ingenieros: con aplicaciones en computadoras personales. 1988 (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [519.5 / C467m](#))
- ✓ CONDE S. D, Carl de Boor. Análisis numérico elemental: Un enfoque algorítmico. Mc. Graw-Hill 1972, (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [511.8 / C761](#) Biblioteca).
- ✓ CORMICK MC., John M. and SALVADOR M.C. Numerical Methods in FORTRAN. 1964. Prentice-Hall Inc Englewood Cliffs N:J.
- ✓ CURTIS, F. Gerald, WHEATLEY, O. Patrick. Análisis numérico con aplicaciones. Tr. Hugo Villagomez Vasquez. 6 Ed. Pearson Educación. 2000, 698p. ISBN 968-444-393-5
- ✓ FADDEEVA, V.N. Computational methods of linear algebra, Dover Publications. 1969, New York.
- ✓ GASTINEL Noël; Análisis numérico lineal. tr. Javier Ruiz Fernández de Pinedo. 1975. (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [511.7 / G255](#)).
- ✓ GREENSPAN, D. Theory and solutions of Ordinary Differential Equations. 1960 The. Mc Millan Co. New York.
- ✓ KINCAID David y Ward Cheney; Análisis numérico: Las matemáticas del cálculo científico. tr. Rafael. 1994 (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [515 / K51a](#)).
- ✓ LUTHE. Rodolfo, OLIVERA Antonio, SCHUTZ Fernando, Métodos numéricos. 1986 (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [511.7 / L973m](#)).
- ✓ McCracken, Daniel D., Métodos numéricos y programación fortran: con aplicaciones en ingeniería y ciencias. 1986. Editorial Limusa. México. (Biblioteca USCO Nro. Topográfico: [001.6424 / M117](#)).
- ✓ NAKAMURA Shoichiro; Métodos numéricos aplicados con software. tr. Oscar Alfredo Palmas Velasco. Prentice Hall Hispanoamericana S.A. 1995. 570p. (Biblioteca USCO. Nro. Topográfico: [511.8 / N163m](#)) ISBN 968-880-263-8
- ✓ NAKAMURA Shoichiro; Análisis numérico y visualización gráfica con MatLab. tr. Roberto Escalona Garcia. Prentice Hall Hispanoamericana S.A. 1997. (Biblioteca USCO N ro Topográfico: [515.1 / N163a](#)). 465p. ISBN 968-880-980-1
- ✓ NIETO RAMIREZ José A., Métodos numéricos en computadoras digitales. Editorial Limusa 1980. (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [001.64042 / N677](#)).

- ✓ RALSTON Anthony; Introducción al análisis numérico. tr. Carlos E. Cervantes de Gortari. Editorial Limusa. Mexico. 1978. 629p. (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [511.7 / R164.](#))
- ✓ SCARBOROUGH, J.B Numerical mathematics analysis
- ✓ SIERRA ROMERO, Alberto. Manual de Métodos Numéricos. Universidad Tecnológica de Pereira.
- ✓ SMITH, W. Allen; Análisis numérico. tr. Francisco Javier Sánchez Bernabe; Rev. Téc. José Luis Turriza Pinto. Prentice Hall Hispanoamericana S.A. 1988. 608p. (Biblioteca USCO Nro Topográfico: [515 / S664a](#)) ISBN 968-880-119-4.
- ✓ STANTON, Ralph G. Numerical Methods for Science and Engineering. 1967. Prentice-Hall Inc. Englewood Cliffs N.J

Bibliografía OnLine:

http://anamat1.csi.ull.es/anamat_p/Titulaciones/matematicas.htm
<http://arxiv.org/>
<http://books.pdox.net/>
<http://luda.azc.uam.mx/curso2/cp2indic.html>
http://mailweb.udlap.mx/~ccastane/Analisis_Numerico_html/Lindley.html#RegresaGral1
<http://mathworld.wolfram.com/>
<http://omega.ilce.edu.mx:3000/sites/ciencia/html/fisica.htm>
<http://pessoal.sercomtel.com.br/matematica/resumos.htm>
<http://proton.ucting.udg.mx/posgrado/cursos/metodos/temario.html>
<http://sai.uam.mx/apoyodidactico/mn/>
<http://uprhmate01.upr.clu.edu/~pnm/notas4061/index.htm>
<http://webdiee.cem.itesm.mx/web/servicios/archivo/tutoriales/metodos/index.html>
<http://webdiee.cem.itesm.mx/web/servicios/archivo/tutoriales/metodos/algoritmos/index.html>
<http://www.ciencia-hoy.retina.ar/indice.htm>
<http://www.cnice.mecd.es/Descartes/>
<http://www.damp.cam.ac.uk/user/fdl/people/sd/lectures/nummeth98/contents.htm>
<http://www.elprisma.com/>
http://www.fortunecity.com/campus/earlham/850/metodos_numericos/indice.htm#
<http://www.geocities.com/SiliconValley/Pines/7894/metodos/>
http://www.iesrodeira.com/metodos_numericos/index-2.htm
<http://www.ii.uam.es/~pedro/ccii/teoria/>
<http://www.itlp.edu.mx/publica/tutors.htm>
<http://www.monografias.com/trabajos13/tumatlab/tumatlab.shtml>
<http://www.rinconmatematico.com/libros.htm>
<http://www.ucsc.cl/~kdt/numerico/index.htm>
<http://www.unalmed.edu.co/~ifasmar/libro.shtml>
<http://www.uv.es/~diaz/mn/fmn.html>
<http://www-gap.dcs.st-and.ac.uk/~history/index.html> (Biografías)