Máster en Materiales y Sistemas Sensores para Tecnologías Medioambientales (Erasmus Mundus)

NOTAS DE CÁLCULO NUMÉRICO

Damián Ginestar Peiró

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

Capítulo 1

Ajuste de curvas

En muchos problemas de tipo práctico, se dispone de gran cantidad de datos que se pretenden ajustar mediante una función con pocos parámetros. Para este tipo de problemas hay que desarrollar una estrategia distinta de la seguida en el problema de la interpolación.

Supongamos que se pretende ajustar los datos de una tabla de la forma

Tabla 1.1.- Tabla de datos.

x_0	x_1	$\cdots$	$\cdots$	x_n
y_0	y_1	$\cdots$	$\cdots$	y_n

mediante una función que depende de k parámetros

$$y = f(x, a_1, a_2, \ldots, a_k) \ .$$

Así, por un lado tenemos los datos que proporciona la tabla

$$y_1, y_2, \ldots, y_n \ , \tag{1.1}$$

y por otro los valores que predice la función

$$f(x_1), f(x_2), \ldots, f(x_n) \ , \tag{1.2}$$

que se pretende que sean lo más cercanos posibles. Se pueden definir distintos errores que miden la distancia entre estos dos conjuntos de puntos. Así el *error máximo* se define como

$$E_\infty = \max_{0 \le i \le n} |f(x_i) - y_i| \ , \tag{1.3}$$

el error medio se define como

$$E_1 = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} |f(x_i) - y_i| \ , \tag{1.4}$$

y el error cuadrático medio

$$E_2 = \left[\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 \right]^{1/2} \ . \tag{1.5}$$

El problema del ajuste se puede plantear como el problema de buscar el valor de los parámetros $a_1, a_2, \ldots, a_k$ que hace mínima la distancia entre los conjuntos de puntos (1.1) y (1.2). Si la distancia entre los dos conjuntos se obtiene usando el error cuadrático medio, el problema del ajuste se denomina ajuste o aproximación de mínimos cuadrados. Veamos algunos ejemplos.

1.1. Recta de mínimos cuadrados

Supongamos que se quiere ajustar los datos de la Tabla 1.1 mediante una recta de la forma

$$f(x, a, b) = ax + b \ .$$

El error cuadrático medio para este caso es de la forma

$$E_2 = \left[\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} (y_i - ax_i - b)^2 \right]^{1/2} \ .$$

Para calcular a y b que hagan mínimo el error, se plantean las ecuaciones normales

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial a} &= \left(\frac{1}{n+1}\right)^{1/2} \frac{1}{2} \left[\sum_{i=0}^{n} (y_i - ax_i - b)^2 \right]^{-1/2} 2 \sum_{i=0}^{n} (y_i - ax_i - b)(-x_i) = 0 \ , \\
\frac{\partial E}{\partial b} &= \left(\frac{1}{n+1}\right)^{1/2} \frac{1}{2} \left[\sum_{i=0}^{n} (y_i - ax_i - b)^2 \right]^{-1/2} (-2) \sum_{i=0}^{n} (y_i - ax_i - b) = 0 \ ,
\end{aligned}$$

con lo que se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{n} y_i x_i - a \sum_{i=0}^{n} x_i^2 - b \sum_{i=0}^{n} x_i = 0 \ , \\
\sum_{i=0}^{n} y_i - a \sum_{i=0}^{n} x_i - b \sum_{i=0}^{n} 1 = 0 \ .
\end{aligned}$$

Utilizando la Regla de Cramer obtenemos las soluciones

$$
\begin{aligned}
a &= \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} y_i & \sum_{i=0}^{n} 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} 1 \end{vmatrix}} = \\
&= \frac{(n+1)\sum_{i=0}^{n} y_i x_i - \left(\sum_{i=0}^{n} y_i\right)\left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)}{(n+1)\sum_{i=0}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)\left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)} \qquad (1.6) \\
b &= \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} y_i x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} y_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} 1 \end{vmatrix}} = \\
&= \frac{\left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right)\left(\sum_{i=0}^{n} y_i\right) - \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)\left(\sum_{i=0}^{n} y_i x_i\right)}{(n+1)\sum_{i=0}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)\left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)} \qquad (1.7)
\end{aligned}
$$

Veamos un ejemplo. Dada la tabla de datos siguiente:

Tabla 1.2.- Tabla de datos.

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	1.3	3.5	4.2	5.0	7.0	8.8	10.1	12.5	13.0	15.6

Trataremos de ajustar la nube puntos mediante una recta usando la aproximación de mínimos cuadrados. Basta para ello, utilizar las expresiones (1.6) y (1.7) para calcular los parámetros de la recta, obteniendo

$$a = 1{,}538, \quad b = -0{,}360.$$

En la Figura 1.1 se muestra la nube de puntos y la recta ajustada.

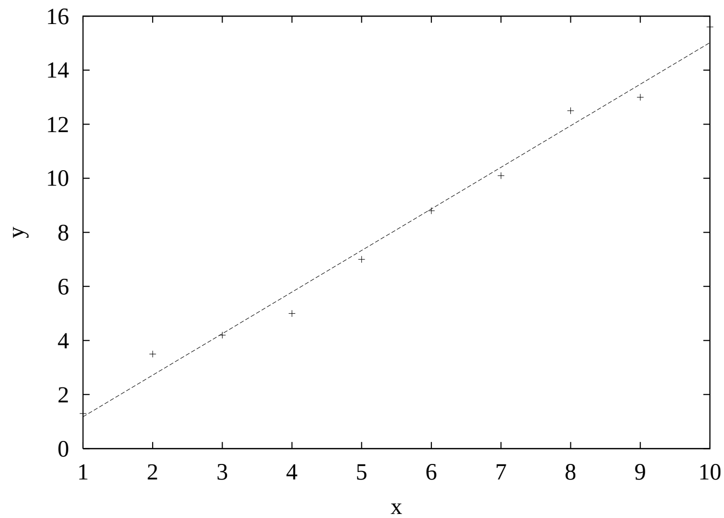

Fig. 1.1.- Nube de puntos asociada a la Tabla 1.2 y su recta de mínimos cuadrados.

Hay distintas funciones que se pueden reducir a una recta mediante un cambio de variable y, por tanto, se pueden usar para ajustar los datos de una tabla siguiendo una metodología similar a la que se ha expuesto. Como ejemplo, se muestran las siguientes funciones:

$$y = a\frac{1}{x} + b \quad \rightarrow \quad y = at + b \;\;, \quad t = \frac{1}{x} \;,$$

$$y = \frac{d}{x+c} \quad \rightarrow \quad x = d\frac{1}{y} - c \;\;,$$

$$y = \frac{x}{ax+b} \quad \rightarrow \quad \frac{x}{y} = ax + b \;\;,$$

$$y = ce^{ax} \quad \rightarrow \quad \ln(y) = \ln(c) + ax \;\;,$$

$$y = cx^{a} \quad \rightarrow \quad \ln(y) = \ln(c) + a\ln(x) \;\;,$$

$$y = \frac{1}{(ax+b)^2} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{y}} = ax + b \;\;,$$

1.2. Parábola de mínimos cuadrados

Supongamos ahora que se quiere ajustar los datos de la Tabla 1.1 mediante una parábola de la forma

$$f(x, a_0, a_1, a_2) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \ . \tag{1.8}$$

El error cuadrático medio para este caso es de la forma

$$E_2 = \left[\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right)^2 \right]^{1/2} \ .$$

Los valores de los parámetros a_0 a_1 y a_2 se obtienen resolviendo las ecuaciones normales

$$\frac{\partial E_2}{\partial a_0} = 0 \ , \quad \frac{\partial E_2}{\partial a_1} = 0 \ , \quad \frac{\partial E_2}{\partial a_2} = 0 \ .$$

que dan lugar al sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n} y_i &= a_0 \sum_{i=0}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 \ , \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i &= a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 \ , \\ \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^2 &= a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=0}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=0}^{n} x_i^n \ , \end{aligned} \tag{1.9}$$

La solución del sistem (1.9) nos proporciona los parámetros de la parábola de mínimos cuadrados.

Consideremos los datos de la tabla siguiente

Tabla 1.3.- Tabla de datos.

x_i	0	0.25	0.5	0.75	1.0
y_i	1.0000	1.2840	1.6487	2.1170	2.7183

Ajustaremos los puntos mediante una parábola. Planteando las ecuaciones (1.9) y resolviéndolas, obtenemos

$$a_0 = 1{,}0052, \quad a_1 = 0{,}8641, \quad a_2 = 0{,}8437.$$

En la Figura 1.2 se muestra la nube de puntos y la parábola ajustada.

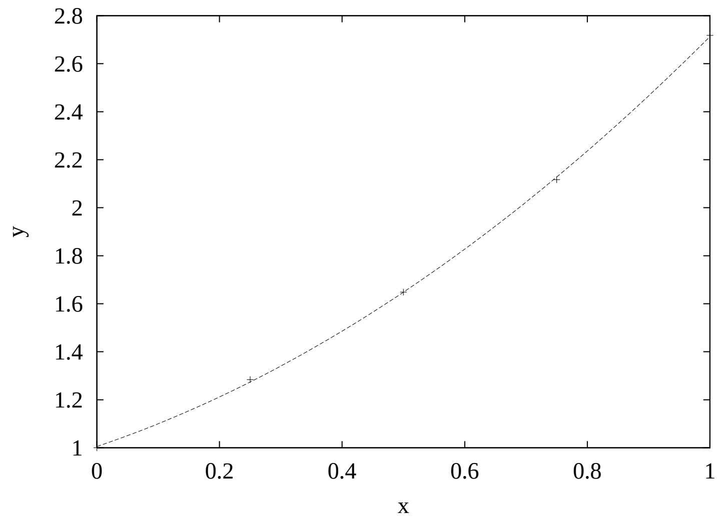

Fig. 1.2.- Nube de puntos asociada a la Tabla 1.3 y su parábola de mínimos cuadrados.

1.3. Ajuste no lineal

Veremos algunos ejemplos donde al aplicar la metodología del ajuste por mínimos cuadrados se obtienen ecuaciones no lineales, que en general no tienen una solución analítica. No obstante va a ser posible estimar los valores de de los parámetros de las funciones utilizando métodos numéricos que estudiaremos en el próximo capítulo.

Hay muchos procesos que se pueden modelizar mediante una ecuación de la forma

$$y(x) = C_1 e^{\lambda_1 x} + C_2 e^{\lambda_2 x} \ . \tag{1.10}$$

Piénsese, por ejemplo, en la solución de una ecuación diferencial lineal de la forma

$$y'' + ay' + by = 0 \ ,$$

donde no se conozcan los parámetros a, y b. Su solución general será de la forma (1.10) con

$$\lambda_{1,2} = \frac{-a \pm \sqrt{a^2 - 4b}}{2} \ .$$

Nos planteamos pues, ajustar una función de la forma (1.10) a los datos de la Tabla 1.1. El error cuadrático medio en este caso es de la forma

$$E_2 = \left[\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right)^2 \right]^{1/2} .$$

Las ecuaciones normales

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_2}{\partial C_1} &= \frac{\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right) \left(e^{\lambda_1 x_i} \right)}{(n+1)^{1/2} \left[\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right)^2 \right]^{1/2}} = 0 \ , \\
\frac{\partial E_2}{\partial C_2} &= \frac{\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right) \left(e^{\lambda_2 x_i} \right)}{(n+1)^{1/2} \left[\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right)^2 \right]^{1/2}} = 0 \ , \\
\frac{\partial E_2}{\partial \lambda_1} &= -\frac{\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right) \left(C_1 x_i e^{\lambda_1 x_i} \right)}{(n+1)^{1/2} \left[\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right)^2 \right]^{1/2}} = 0 \ , \\
\frac{\partial E_2}{\partial \lambda_2} &= -\frac{\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right) \left(C_2 x_i e^{\lambda_2 x_i} \right)}{(n+1)^{1/2} \left[\sum_{i=0}^{n} \left(y_i - C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_2 e^{\lambda_2 x_i} \right)^2 \right]^{1/2}} = 0 \ ,
\end{aligned}$$

o, lo que es lo mismo,

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^{n} y_i e^{\lambda_1 x_i} - C_1 \sum_{i=0}^{n} e^{2\lambda_1 x_i} - C_2 \sum_{i=0}^{n} e^{(\lambda_1+\lambda_2) x_i} = 0 \ , \\
&\sum_{i=0}^{n} y_i e^{\lambda_2 x_i} - C_1 \sum_{i=0}^{n} e^{(\lambda_1+\lambda_2) x_i} - C_2 \sum_{i=0}^{n} e^{2\lambda_2 x_i} = 0 \ , \\
&\sum_{i=0}^{n} y_i x_i C_1 e^{\lambda_1 x_i} - C_1^2 \sum_{i=0}^{n} e^{2\lambda_1 x_i} - C_1 C_2 \sum_{i=0}^{n} x_i e^{(\lambda_1+\lambda_2) x_i} = 0 \ , \\
&\sum_{i=0}^{n} y_i x_i C_2 e^{\lambda_2 x_i} - C_1 C_2 \sum_{i=0}^{n} e^{(\lambda_1+\lambda_2) x_i} - C_2^2 \sum_{i=0}^{n} x_i e^{2\lambda_2 x_i} = 0 \ .
\end{aligned}$$

que es un sistema de ecuaciones no lineales. La solución de este tipo de problemas es complicada en general y se suele abordar mediante métodos iterativos.

Ejemplo 1.1 *Se tienen dos reacciones químicas consecutivas*

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$$

de las que se conoce que la evolución con el tiempo de la concentración de la especie B viene dada por los valores

t (seg)	*0*	*0.5*	*1.0*	*1.5*	*2.0*	*2.5*	*3.0*	*5.0*	*10*
$[B]$	*0.000*	*1.003*	*1.500*	*1.725*	*1.815*	*1.820*	*1.782*	*1.505*	*0.892*

La evolución con el tiempo de las concentraciones de A y B se puede modelizar mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{d[A]}{dt} &= -k_1[A] \ , \\ \frac{d[B]}{dt} &= -k_2[B] + k_1[A] \ . \end{aligned}$$

Se pide estimar los valores de k_1 y k_2 que ajusten los valores experimetales sabiendo que $[A](0) = 8$ moles.

Solución.-

En primer lugar hay que resolver el problema de valores iniciales asociado a las concentraciones.

De la primera ecuación obtenemos

$$[A] = C_1 e^{-k1t} \ ,$$

e imponiendo que se satisfaga la condición inicial $[A](0) = 8$, llegamos a que

$$[A] = 8e^{-k_1 t} \ .$$

La segunda ecuación queda

$$\frac{d[B]}{dt} = -k_2[B] + k_1 8e^{-k_1 t} \ .$$

La solución de la ecuación homogénea es

$$[B]_h = C_2 e^{-k_2 t} \ ,$$

se prueba una solución particular de la forma

$$[B]_p = \alpha e^{-k_1 t}$$

e imponiendo que sea solución se tiene

$$[B]_p = \frac{8k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} \ .$$

Se tiene pues la solución general

$$[B] = C_2 e^{-k_2 t} + \frac{8k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} \ .$$

La constante C_2 se determina utilizando la condición inicial $[B](0) = 0$, con lo que se obtiene

$$[B] = \frac{8k_1}{k_2 - k_1} \left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t} \right) \ .$$

Una vez hemos obtenido la forma funcional de la evolución de la concentración de B, hemos de determinar k_1 y k_2 para que se la función ajuste los datos experimentales. El error cuadrático medio cumple

$$E_2^2 = \sum_{i=1}^{8} \left([B]_i - \frac{8k_1}{k_2 - k_1} \left(e^{-k_1 t_i} - e^{-k_2 t_i} \right) \right)^2 \ ,$$

y las ecuaciones normales son de la forma

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{8} \left([B]_i - \frac{8k_1}{k_2 - k_1} \left(e^{-k_1 t_i} - e^{-k_2 t_i} \right) \right) \times \\
&\times \left(-\frac{8k_2}{(k_2 - k_1)^2} \left(e^{-k_1 t_i} - e^{-k_2 t_i} \right) - \frac{8k_1}{k_2 - k_1} t_i e^{-k_1 t_i} \right) = 0 \ , \\
&\sum_{i=1}^{8} \left([B]_i - \frac{8k_1}{k_2 - k_1} \left(e^{-k_1 t_i} - e^{-k_2 t_i} \right) \right) \times \\
&\left(\frac{8k_1}{(k_2 - k_1)^2} \left(e^{-k_1 t_i} - e^{-k_2 t_i} \right) - \frac{8k_1}{k_2 - k_1} t_i e^{-k_1 t_i} \right) = 0 \ ,
\end{aligned}$$

1.4. Ejercicios

1. Escribir el sistema análogo al (1.9) que se obtiene si en vez de la parábola (1.8), consideramos un polinomo de grado k.

2. Se tomaron los siguientes datos del coeficiente de atenuación en función del espesor de una muestra de taconite

Espesor (cm)	Coeficiente (db/cm)
0.040	26.5
0.041	28.1
0.055	25.2
0.056	26.0
0.062	24.0
0.071	25.0
0.078	27.2
0.082	25.6
0.090	25.0
0.092	26.8

Obtener la recta de mínimos cuadrados asociada a estos datos.

3. Se conoce que la relación existente entre el peso vivo de las larvas de la mariposa nocturna W (g) y el oxígeno consumido por la larva R en ml/h es aproximadamente de la forma

$$R = bW^a \ .$$

Obtener los valores de a y b a partir de los datos de la siguiente tabla

W	R
0.017	0.154
0.087	0.296
0.174	0.363
1.11	0.531
1.74	2.23
4.09	3.58
5.45	3.52
5.96	2.40

4. la Ley de Hooke establece que cuando se aplica una fuerza a un muelle la longitud del muelle y la fuerza están relacionadas linealmente. De un experimento se tienen las siguientes medidas,

$F(l)$	l
2	7.0
4	9.4
6	12.3

Obtener la constante del muelle usando un ajuste de mínimos cuadrados.

5. Bajo ciertas condiciones se conoce que la evolución de una población con el tiempo se puede modelizar mediante una ecuación logística de la forma
$$P(t) = \frac{1000}{1 + Ce^{At}} \ .$$
Obtener C y A para la siguiente tabla de datos

$P(t)$	200	400	650	850	950
t	0	1	2	3	4

6. Dada la tabla de mineralización del nitrógeno

Tiempo (días)	Nmin (mg/kg)
7	9.466
14	8.211
27	15.590
41	17.615
55	20.215
83	21.734

Obtener las ecuaciones normales para el modelo $Nmin = N0(1 - \exp(-kt))$.