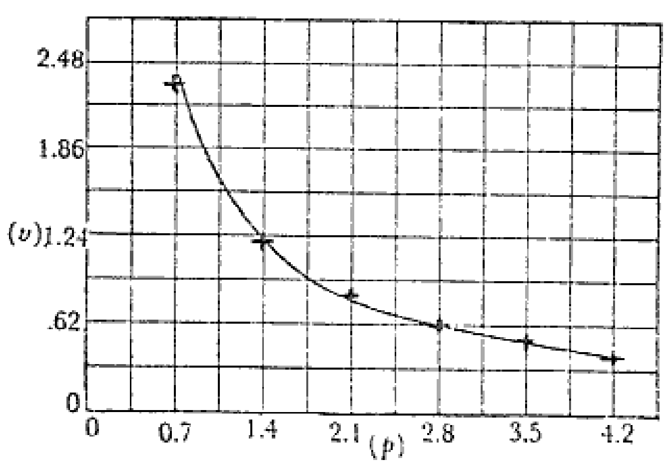
AJUSTE DE CURVAS.

INTRODUCCION.

En las investigaciones científicas y en problemas de ingeniería se considera con frecuencia la observación o medida de dos cantidades. Tales como la distancia y el tiempo para un cuerpo en caida libre, el volúmen de dióxido de carbono disuelto en agua y la temperatura del agua, la carga y el alargamiento de un alambre de características determinadas, el voltaje y la corriente de una lámpara de arco, etc. Los resultados provenientes ya sea de realizar el experimento correspondiente o de cualquier otra fuente bajo condiciones semejantes suelen presentarse en forma de tabla. Así, la tabla que sigue muestra los resultados de las observaciones sobre la presión p del vapor saturado, en Kg/cm^2, y el volumen V en m^3/Kg.

p	0.7	1.4	2.1	2.8	3.5	4.2
V	2.34	1.22	0.84	0.64	0.52	0.41

Representando gráficamente estos datos.



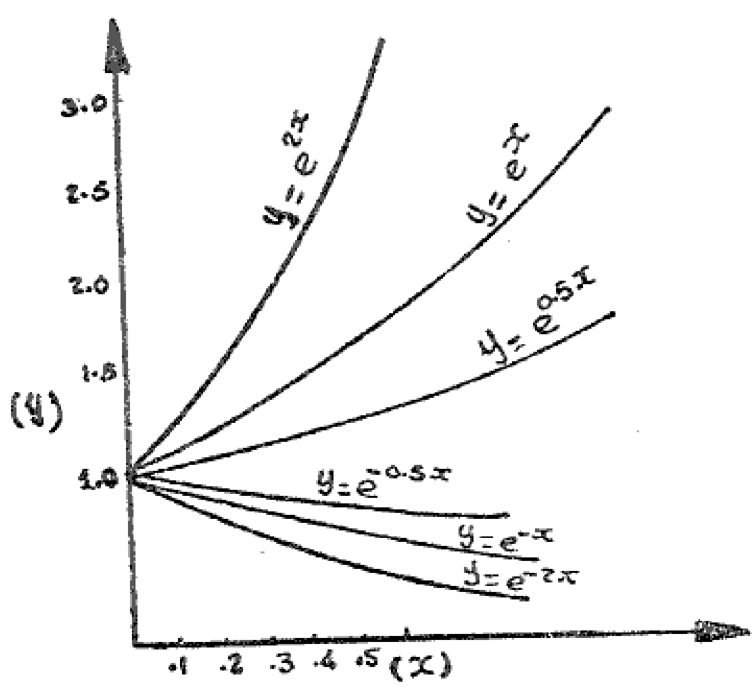
El hecho de que podamos trazar una curva suavemente pasando por los puntos o muy cerca de ellos nos induce a pensar que puede existir alguna relación entre las cantidades medidas, la cual podría representarse matemáticamente por la ecuación de la curva. Siendo las medidas originales, la localización de los puntos y el trazo de la curva aproximaciones, la ecuación también representará sólo aproximadamente la verdadera relación entre las cantidades. A menudo la forma de la curva sugiere el tipo de ecuación, parabólica, exponencial, trigonométrica, etc., pero en todos los casos debemos escoger una ecuación con una forma tan simple como sea posible.

Algunos ejemplos de curvas que aproximan

Línea Recta	La Parábola	Curva Parabólica
$y = bx$ $y = a + bx$	La parábola de segundo grado $y = a + bx + cx^2$	Curva parabólica (donde n es conocida) $y = a + bx^n$

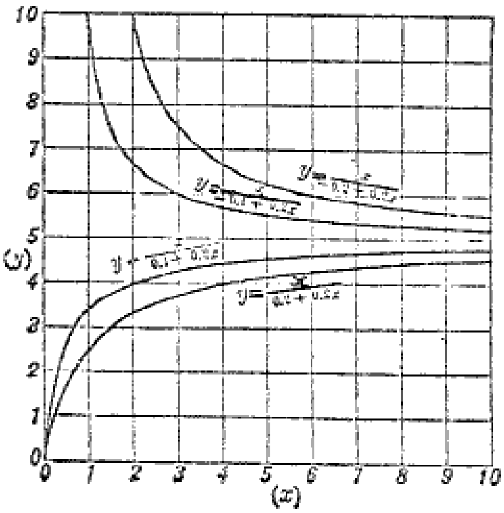
Curvas exponenciales simples.

$y = ae^{bx}$



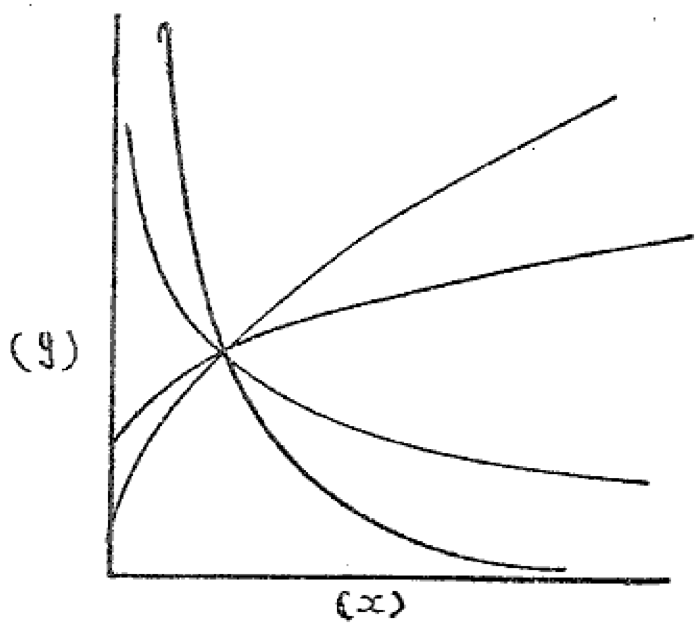
Curva hiperbólica

$$y = \frac{x}{a + bx}$$



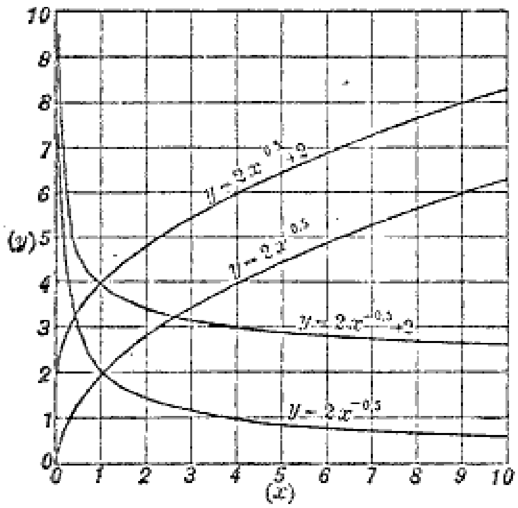
Curvas simples parabólicas
(con dos constantes)

$$y = ax^b$$



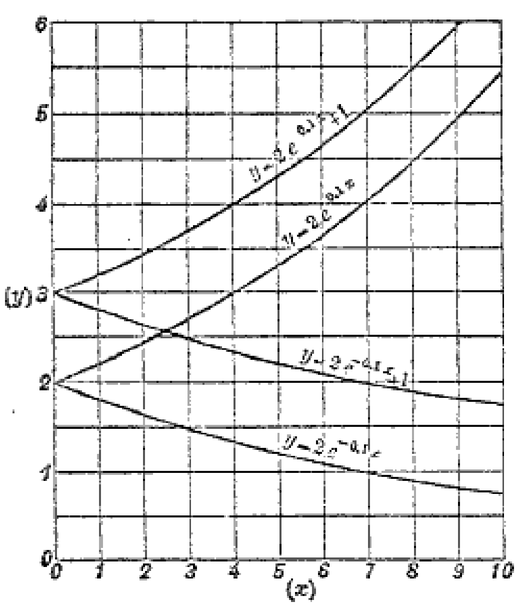
Curva parabólica

$y = ax^b + c$



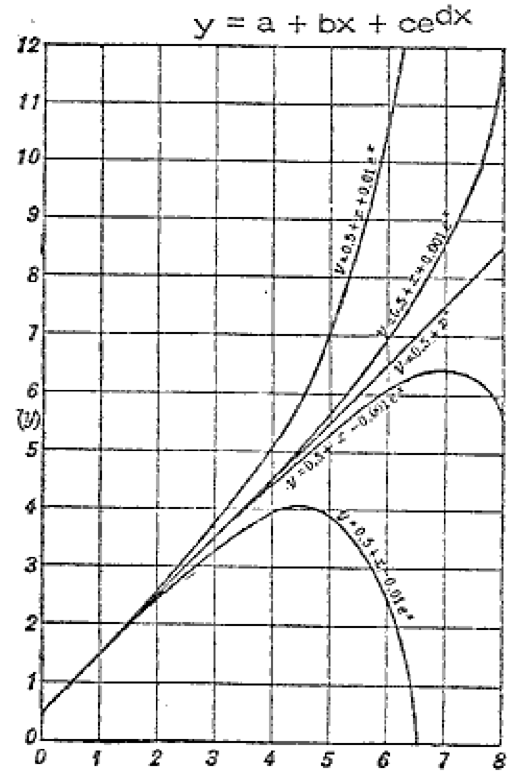
Curva Exponencial

$y = ae^{bx} + c$



Ecuación

$y = a + bx + ce^{dx}$



etc.

La naturaleza del experimento puede darnos una sugerencia sobre la forma de ecuación que representa mejor los datos.

OBJETIVOS.

Al concluir con el estudio de esta unidad deberá ser capaz de:

1. Comprender en que consiste el Método de Mínimos Cuadrados para ajuste de curvas.

2. Dado un conjunto de valores obtenidos experimentalmente, usando el Método de Mínimos Cuadrados, obtener un polinomio de cualquier grado, usando calculadora de escritorio y computadora digital. Saber seleccionar el mejor polinomio.

3. Obtener los modelos exponenciales para ajustar a una serie de datos experimentales.

PROCEDIMIENTO DE APRENDIZAJE.

Estudiar el anexo correspondiente.

EXAMEN DE AUTOEVALUACION.

Obtener el tipo de ecuación apropiada en cada uno de los ejercicios siguientes por el Método de Mínimos Cuadrados, 2 , 4 de la hoja "Modelo Exponencial".

Encontrar el Modelo exponencial para los ejercicios siguientes :

1. Característica volt-ampere de una lámpara de tungsteno de 118 volts; e es la tensión en los bornes, i es la corriente.

e	2	4	8	16	25	32	50	64	100	125
i	0.0245	0.0370	0.0570	0.0588	0.1125	0.1295	0.1715	0.2000	0.2605	0.2965

e	150	180	200	218
i	0.3295	0.3635	0.3865	0.4070

2. Presión-volumen del vapor saturado; v es el volumen en pies cúbicos de una libra de vapor; p es la presión en libras por pulgada cuadrada.

v	26.43	22.40	19.08	16.32	14.04	12.12	10.51	9.147	7.995
p	14.70	17.53	20.80	24.54	28.83	33.71	29.25	45.49	52.52

3. Experimentos sobre la concentración química; x es la concentración de iones de hidrógeno, y es la concentración de ácido hidroclohídrico no disociado.

x	1.68	1.22	0.784	0.426	0.092	0.047	0.0096	0.0049	0.00098
y	1.32	0.676	0.216	0.074	0.0085	0.00315	0.00036	0.00014	0.000018

4. Oscilación de un péndulo largo; A es la amplitud en pulgadas, t es el tiempo transcurrido desde que empezó el movimiento.

t	0	1	2	3	4	5	6
A	10	4.97	2.47	1.22	0.61	0.30	0.14

OPCIONALES (INVESTIGAR MODELOS)

1. Característica magnética del hierro; H es el número de gilberts por cm, - una medida de la intensidad del campo; B es el número de kilolíneas por - cm cuadrado, una medida de la densidad del flujo.

H	8	10	15	20	30	40	60	80
B	13.0	14.0	15.4	16.3	17.2	17.8	18.5	18.8

2. Distancia focal de un lente; p es la distancia al objeto, p' es la distancia de su imagen. $y = \frac{x}{a + bx}$

p	320	240.	180	140	120	100	80	60
p'	21.35	21.80	22.50	23.20	23.80	24.60	26.20	29.00

3. Presión-volumen en una máquina de gas; p es la presión, en libras por pulgada cuadrada: v es el volumen, en pies cúbicos por libra.
$y = ax^b + c$

p	44.7	53.8	73.5	85.8	113.2	135.8
v	7.03	5.85	4.30	3.50	2.50	1.90

4. Ley del enfriamiento; θ es la temperatura de un recipiente de agua en enfriamiento; t es el tiempo desde el principio de la observación, en minutos.

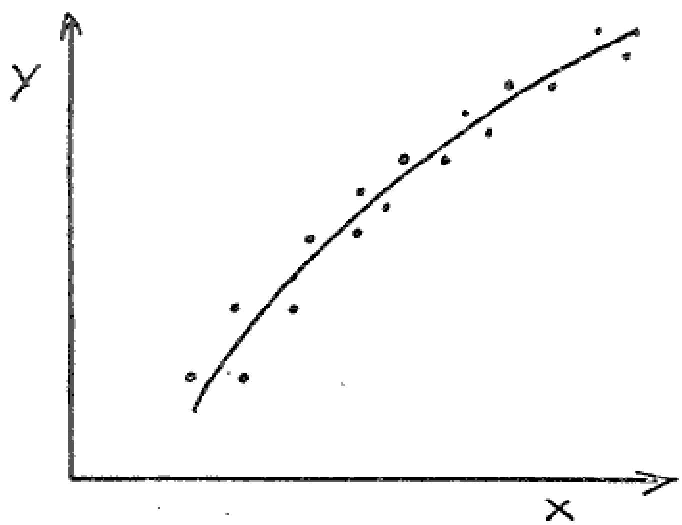
t	0	1	2	3	5	7	10	15	20
θ	92.0	85.3	79.5	74.5	67.0	60.5	53.5	45.0	39.5

ANEXO.

En esta unidad se ve el Método de Mínimos cuadrados para ajustar un polinomio de grado n y los modelos Exponenciales Simples de la forma $y = ae^{bx}$.

Mínimos Cuadrados.

Supóngase que el conjunto de puntos mostrados en la siguiente gráfica son el resultado de un experimento.



De acuero a los puntos, parece tener la forma de un polinomio de segundo grado de la forma:

$$Y = a_1 + a_2X + a_3X^2 + \ldots\ldots \qquad (1)$$

La ecuación (1) puede usarse para representar el conjunto de valores obtenidos experimentalmente, para lo cual se deben determinar los valores de a_1, a_2, a_3, etc.

El procedimiento para determinar estos valores es como sigue:

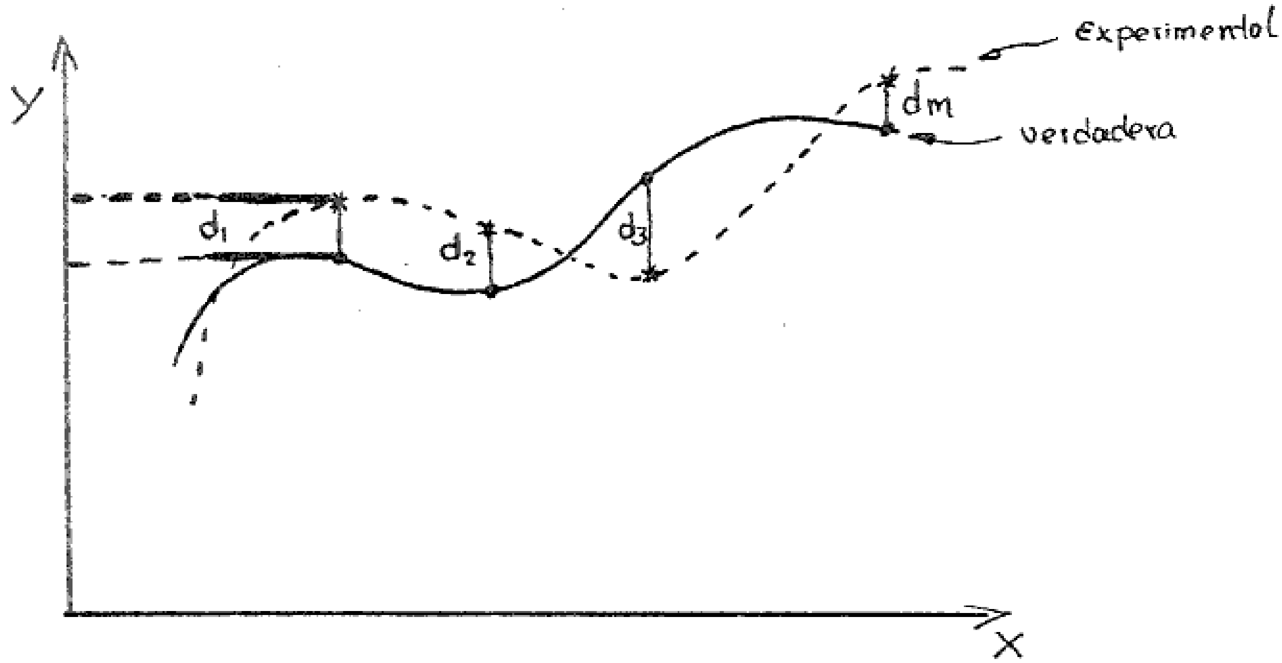
Establecer el criterio para determinar la ecuación que efectivamente representa a los valores obtenidos experimentalmente.

Escribir la ecuación que expresa el error o desviación entre el valor observado y los valores dados por la ecuación.

Habiendo obtenido la ecuación del error, minimizar dicho error.

EVALUACION DEL ERROR.

Considerese la parejasde datos mostrados en la siguiente figura :



Donde :

d = distancia = Y observada − Y obtenida por la ecuación

Y observada = Valor obtenido experimentalmente

Y obtenida por la ecuación = Valor de la función evaluada en cualquier valor de $\underline{X}$

En primera instancia, parece que esta distancia se puede usar para representar el error, sin embargo, habrá distancias positivas y negativas, (un punto que se encuentre arriba de la curva reportará una distancia positiva y uno de bajo, negativa) de modo que el error promedio para dos puntos como los mostrados será pequeño aunque los errores individuales les sean grandes.

Esta dificultad podría ser resuelta usando el valor absoluto de la distancia, sin embargo al derivar la función del valor absoluto se generan ciertos problemas.

Así una solución podría ser definir el error como el cuadrado de la distancia, - esto elimina la dificultad del signo.

Por esta razón el método se llama :

METODO DE MINIMOS CUADRADOS

$$S = d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 + \dots\dots\dots\dots + d_m^2$$

en donde S es la suma de los cuadrados de las diferencias entre el valor calculado y el valor observado y por lo tanto es el valor que debe minimizarse.

$$S = \sum_{i=1}^{m} (Y \text{ observada} - Y \text{ calculada})^2 \qquad \underline{\underline{\text{CASO CUADRATICO}}}$$

Siendo el caso de que la curva supuesta es una ecuación de segundo grado, se tiene la ecuación:

$$S = \sum_{i=1}^{m} (Y_i - a_1 - a_2X_i - a_3X_i^2)^2$$

Para minimizar la función anterior, derivando parcialmente con respecto a $\underline{a_1}$, $\underline{a_2}$ y $\underline{a_3}$ e igualando a cero.

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = \frac{\partial S}{\partial a_2} = \frac{\partial S}{\partial a_3} = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{m} (Y_i - a_1 - a_2X_i - a_3X_i^2) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = -2 \sum_{i=1}^{m} X_i (Y_i - a_1 - a_2X_i - a_3X_i^2) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_3} = -2 \sum_{i=1}^{m} X_i^2 (Y_i - a_1 - a_2X_i - a_3X_i^2) = 0$$

(Obsérvese que las variables son a_1, a_2 y a_3 y Y_i, X_i son constantes).

esas ecuaciones se pueden expresar de acuerdo como sigue:

$$\sum_{i=1}^{m} a_1 + \sum_{i=1}^{m} X_i a_2 + \sum_{i=1}^{m} X_i^2 a_3 = \sum_{i=1}^{m} Y_i$$

$$\sum_{i=1}^{m} X_i a_1 + \sum_{i=1}^{m} X_i^2 a_2 + \sum_{i=1}^{m} X_i^3 a_3 = \sum_{i=1}^{m} X_i Y_i$$

$$\sum_{i=1}^{m} X_i^2 a_1 + \sum_{i=1}^{m} X_i^3 a_2 + \sum_{i=1}^{m} X_i^4 a_3 = \sum_{i=1}^{m} X_i^2 Y_i$$

Lo anterior lo podemos expresar en forma matricial :

$$\begin{bmatrix} M & \sum_{i=1}^{m} X_i & \sum_{i=1}^{m} X_i^2 \\ \sum_{i=1}^{m} X_i & \sum_{i=1}^{m} X_i^2 & \sum_{i=1}^{m} X_i^3 \\ \sum_{i=1}^{m} X_i^2 & \sum_{i=1}^{m} X_i^3 & \sum_{i=1}^{m} X_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} Y_i \\ \sum_{i=1}^{m} X_i Y_i \\ \sum_{i=1}^{m} X_i^2 Y_i \end{bmatrix}$$

Matriz de Coeficientes Incógnitas Constantes

La fórmula general para un polinomio de grado $\underline{n}$ en donde hay $\underline{m}$ parejas de datos es :

$$\begin{bmatrix} M & \sum_{i=1}^{m} X_i & \sum_{i=1}^{m} X_i^2 & \cdots\cdots & \sum_{i=1}^{m} X_i^n \\ \sum_{i=1}^{m} X_i & \sum_{i=1}^{m} X_i^2 & \sum_{i=1}^{m} X_i^3 & \cdots\cdots & \sum_{i=1}^{m} X_i^{n+1} \\ \sum_{i=1}^{m} X_i^2 & \sum_{i=1}^{m} X_i^3 & \sum_{i=1}^{m} X_i^4 & \cdots\cdots & \sum_{i=1}^{m} X_i^{n+2} \\ & & & & \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} X_i^n & \sum_{i=1}^{m} X_i^{n+1} & \sum_{i=1}^{m} X_i^{n+2} & \cdots & \sum_{i=1}^{m} X_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{m} Y_i \\ \sum_{i=1}^{m} X_i Y_i \\ \sum_{i=1}^{m} X_i^2 Y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{m} X_i^{m} Y_i \end{bmatrix}$$

Como se puede observar, el problema consiste en lo siguiente :

1. Obtener la matriz de coeficientes.

2. Resolver el sistema de ecuaciones simultáneas.

Además es claro que :

a) Si n es el grado del polinomio, hay n + 1 valores de la matriz de coeficientes y n + 1 ecuaciones.

b) El máximo exponente de X en los términos de la sumatoria es 2n.

Puede ser que los datos no representen un polinomio de 2º grado sino que representen uno de 3º ó 4º grados.

El ajuste de curvas es un procedimiento de tanteo y error, si una curva no representa los datos, entonces se intenta con un polinomio de grado superior.

Ejemplo 1.

Dadas las siguientes parejas de valores obtenidos experimentalmente.

X	Y
0.0000	0.0000
0.1000	0.1002
0.2000	0.2013
0.3000	0.3045
0.4000	0.4108
0.5000	0.5211
0.6000	0.6367
0.7000	0.7586
0.8000	0.8881
0.9000	1.0265
1.0000	1.1752

Usando el procedimiento de mínimos cuadrados, determinar los polinomios de 2º, 3º y 4º grado, trazar sus gráficas para escoger la curva más apropiada.

Solución.- Polinomio de segundo grado.

En primer lugar se deben determinar los coeficientes de la matriz y los elementos constantes.

En este caso los elementos de la matriz son :

$M = 11$

$$\sum_{i=1}^{11} X_i = 0.0 + 0.1 + 0.2 + \dots + 1.0 = 5.5$$

$$\sum_{i=1}^{11} X_i^2 = 0.0^2 + 0.1^2 + 0.2^2 + \dots + 1.0^2 = 3.85$$

$$\sum_{i=1}^{11} X_i^3 = 0.0^3 + 0.1^3 + 0.2^3 + \dots + 1.0^3 = 3.0249$$

$$\sum_{i=1}^{11} X_i^4 = 0.0^4 + 0.1^4 + 0.2^4 + \dots + 1.0^4 = 2.5333$$

Los términos constantes son:

$$\sum_{i=1}^{11} Y_i = 0.0 + 0.1002 + 0.2013 + \dots + 1.1752 = 6.0229$$

$$\sum_{i=1}^{11} X_i Y_i = 0.0 \times 0.0 + 0.1 \times 0.1002 + 0.2 \times 0.2013 + \dots + 1.0 \times 1.1752 = 4.2891$$

$$\sum_{i=1}^{11} X_i^2 Y_i = 0.0^2 \times 0.0 + 0.1^2 \times 0.1002 + 0.2^2 \times 0.2013 + \dots = 3.4084$$

De acuerdo con esto, el sistema de ecuaciones a resolver es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} 11 & 5.500 & 3.8500 \\ 5.500 & 3.850 & 3.02499 \\ 3.850 & 3.02499 & 2.5332 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6.0229 \\ 4.2891 \\ 3.4084 \end{bmatrix}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones empleando el método de eliminación de Gauss se obtienen los siguientes resultados

$$a_1 = 0.006727$$
$$a_2 = 0.895462$$
$$a_3 = 0.265963$$

y el polinomio de segundo grado es :

$$Y = 0.006727 + 0.895462X + 0.265963X^2$$

Para el caso del polinomio de 3er. grado se requiere

$M = 11$

$\sum_{i=1}^{11} Y_i = 6.0229$ $\sum_{i=1}^{11} X_i = 5.5$ $\sum_{i=1}^{11} X_i^2 = 3.85$

$\sum_{i=1}^{11} X_i^3 = 3.0249$ $\sum_{i=1}^{11} X_i^4 = 2.5333$ $\sum_{i=1}^{11} X_i^5 = 2.2082$

$\sum_{i=1}^{11} X_i^6 = 1.9784$ $\sum_{i=1}^{11} X_i Y_i = 4.2891$ $\sum_{i=1}^{11} X_i^2 Y_i = 3.4084$

$\sum_{i=1}^{11} X_i^3 Y_i = 2.8773$

Y el sistema de ecuaciones a resolver es :

$$\begin{bmatrix} 11.00 & 5.50 & 3.85 & 3.0249 \\ 5.50 & 3.85 & 3.0249 & 2.5333 \\ 3.85 & 3.0249 & 2.53329 & 2.2082 \\ 3.0249 & 2.5333 & 2.2082 & 1.9784 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6.0229 \\ 4.2891 \\ 3.4084 \\ 2.8773 \end{bmatrix}$$

Cuya solución es :

$$\begin{aligned} a_1 &= -0.000112 \\ a_2 &= 1.004150 \\ a_3 &= -0.019075 \\ a_4 &= 0.190032 \end{aligned}$$

Y el polinomio queda como sigue :

$$y = -0.000112 + 1.004150X - 0.019075X^2 + 0.190032X^3$$

Polinomio de cuarto grado.

Repitiendo el procedimiento anterior, se obtienen los siguientes resultados:

$$a_1 = -0.000112$$
$$a_2 = 0.994595$$
$$a_3 = 0.028713$$
$$a_4 = 0.113563$$
$$a_5 = 0.038237$$

Quedando el polinomio como se muestra:

$$y = -0.000112 + 0.994595X + 0.028713X^2 + 0.113563X^3 + 0.038237X^4$$

Ejemplo 2.

De un experimento químico se obtuvieron los resultados de la tabla, donde A es la cantidad de sustancia remanente en una reacción después de un intervalo de tiempo t. Encontrar por Mínimos Cuadrados los polinomios de segundo y tercer grado.

t	a
2	94.8
5	87.9
8	81.3
11	74.9
14	68.7
17	64.0
27	49.3
31	44.0
35	39.1
44	31.6

Desarrollamos las sumatorias:

$$x_i = 194$$

$$x_i^2 = 5550$$

$$x_i^3 = 187166$$

$$x_i^4 = 6844998$$

$$x_i^5 = 2.625 \times 10^8$$

$x_i^6 = 1.040 \times 10^{10}$

$x_i y_i = 9607.2$

$y_i = 635.2$

$x_i^2 y_i = 236102.8$

$x_i^3 y_i = 7.3054 \times 10^6$

* Nota : Más adelante para este ejemplo se encuentra un mejor ajuste con otros modelos.

Planteamos los sistemas de ecuaciones :

1. Para el polinomio de 2º grado.

$$\begin{bmatrix} 10 & 194 & 5550 \\ 194 & 5550 & 187166 \\ 5550 & 187166 & 6844998 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 635.6 \\ 9607.2 \\ 236102.8 \end{bmatrix}$$

Resolviendo :

$a_1 = 99.298$

$a_2 = -2.4140$

$a_3 = 19.9879 \times 10^{-3}$

El polinomio ajustado es :

$P(x) = 99.298 - 2.4140(x) + 19.9879 \times 10^{-3}(x^2)$ % de error

Para $x = 5$ $\qquad P(5) = \dfrac{87.9 - 87.21}{87.9} = 0.7849\%$

$P(5) = 99.298 - 2.4140(5) + 19.9879 \times 10^{-3}(25)$

$P(5) = 87.21$ $\qquad P(17) = \dfrac{64 - 64.0185}{64} = 0.0289\%$

$P(17) = 64.0185$

$P(44) = 31.760$ $\qquad P(41) = \dfrac{31.6 - 31.760}{31.6} = 0.506\%$

2. Para el polinomio de Tercer Grado.

$$\begin{bmatrix} 10 & 194 & 5550 & 187166 \\ 194 & 5550 & 187166 & 6844998 \\ 5550 & 187166 & 6844998 & 2.625\times 10^{8} \\ 187166 & 6844998 & 2.625\times 10^{8} & 1.040\times 10^{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 635.6 \\ 9607.2 \\ 236102.8 \\ 7.3054\times 10^{6} \end{bmatrix}$$

$$a_1 = 99.602$$
$$a_2 = -2.4914$$
$$a_3 = 0.0242$$
$$a_4 = -62.29 \times 10^{-6}$$

$$P(x) = 99.602 - 2.4914(x) + 0.0242(x^2) - 62.29\times 10^{-6}(x^3)$$

$P(5) = 87.742$ % de error

$$P(5) = \frac{87.9 - 87.742}{87.9} = 0.179\%$$

$P(17) = 63.93$

$$P(17) = \frac{64 - 63.93}{64} = 0.1093\%$$

$P(44) = 31.52$

$$P(44) = \frac{31.6 - 31.52}{31.6} = 0.253\%$$

PROGRAMA DE MINIMOS C. PARA LOS EXPERIMENTOS DE ESSON Y HARCØURT (Mas adelante de la Unidad)

```
C     PROGRAMA DE MINIMOS CUADRADOS PARA UNA FUNCION DE HASTA
C     SEPTIMO GRADO
C
C
      DIMENSION XX(50),Y(50),S(15),P(15),AR(8,8),BR(8,9),
     -VEC(8),CACHO(8,9)
      INTEGER CO
C     LEE EL NUMERO DE PAREJAS DE DATOS M, EL GRADO DE LA
C     FUNCION N
      DISPLAY "DATOS: M,N"
      READ(5,*)M,N
      DISPLAY M,N
C     LEE LOS DATOS X Y Y
      DISPLAY "DATOS X Y EN OTRO RENGLON LOS Y"
      READ(5,*)(XX(I),I=1,M)
      READ(5,*)(Y(I),I=1,M)
      DISPLAY (XX(I),I=1,M)
      DISPLAY (Y(I),I=1,M)
C     LIMPIA A S EL CUAL RECIBIRA LA SUMATORIA DE LAS X
C     ELEVADAS
      F=2*N+1
      DO 1 L=1,F
      S(L)=0
    1 CONTINUE
      DO 2 L=1,F
      DO 2 I=1,M
      S(L)=S(L)+XX(I)**(L-1)
    2 CONTINUE
      DISPLAY "SUMATORIA DE LAS X ELEVADAS"
      DISPLAY (S(L),L=1,F)
      OR=N+1
C     LIMPIA LOS LUGARES PARA SUMATORIAS DE LOS PRODUCTOS DE
C     LAS Y POR LAS X ELEVADAS
      DO 3 L=1,OR
      P(L)=0
    3 CONTINUE
      DO 4 L=1,OR
      DO 4 I=1,M
      P(L)=P(L)+Y(I)*(XX(I)**(L-1))
    4 CONTINUE
      DISPLAY "SUMATORIA DE LOS PRODUCTOS"
      DISPLAY (P(L),L=1,OR)
C     COLOCA EN EL ARREGLO AR LAS SUMATORIAS CALCULADAS DE LAS
C     X ELEVADAS, EN BASE A LO CONVENIDO POR EL METODO DE M.C.
      K=0
      DO 5 I=1,OR
      DO 6 J=1,OR
      AR(I,J)=S(J+K)
    6 CONTINUE
      K=K+1
    5 CONTINUE
      IF(AR(1,1).LT.AR(OR,1))GOTO 22
      DO 31 I=1,OR
      DO 31 J=1,OR
      BR(I,J)=AR(I,J)
```

```
   31 CONTINUE
C     AHORA ACOMODA LA SUMATORIA DE PRODUCTOS EN BR
      DO 32 I=1,OR
      BR(I,OR+1)=P(I)
   32 CONTINUE
      GO TO 102
   22 DO 7 I=1,OR
C     INVIERTE EL ORDEN DE LOS RENGLONES DE AR, DE ABAJO HACIA
C     ARRIBA, PONLOS DE ARRIBA HACIA ABAJO EN BR, PARA FACILITAR
C     EL CALCULO DE LAS CONSTANTES
      C=N+2-I
      DO 7 J=1,OR
      BR(C,J)=AR(I,J)
    7 CONTINUE
C     INVIERTE EL ORDEN DE LAS SUMATORIAS DE PRODUCTOS Y PONLAS
C     EN BR, EL CUAL ES EL ARREGLO PARA ENCONTRAR LOS VALORES DE
C     LAS CONSTANTES DE LA FUNCION
      DO 8 I=1,OR
      C=N+2-I
      BR(C,N+2)=P(I)
    8 CONTINUE
  102 DISPLAY "LA MATRIZ DE LA QUE SE CALCULARAN LAS CONSTANTES
     -DADA POR RENGLONES ES:"
      W=N+2
      DISPLAY"(DONDE CADA RENGLON TIENE",W,"DATOS)"
      DISPLAY ((BR(I,J),J=1,N+2),I=1,OR)
      ERROPES=0.0
      L=1
      CO=1
  100 IF(L+1.GT.OR)GO TO 101
      CALL ORDENADOR(OR,W,L,CO,BR)
  101 DIV=BR(L,CO)
      DO 10 J=CO,W
   10 BR(L,J)=BR(L,J)/DIV
      IF(L.EQ.1)GOTO30
      DO 20 I=1,L-1
      VE=BR(I,CO)
      DO 21 J=CO,W
      CALL ERROR(BR(I,J),VE,BR(L,J),ERR)
      ERROPES=ERROPES+ERR
      BR(I,J)=BR(I,J)-VE*BR(L,J)
   21 CONTINUE
   20 CONTINUE
   30 IF(L+1.GT.OR)GO TO 50
      DO 40 I=L+1,OR
      VE=BR(I,CO)
      DO 41 J=CO,W
      CALL ERROR(BR(I,J),VE,BR(L,J),ERR)
      ERROPES=ERROPES+ERR
      BR(I,J)=BR(I,J)-VE*BR(L,J)
   41 CONTINUE
   40 CONTINUE
      L=L+1
      CO=CO+1
      GO TO 100
   50 DISPLAY "     LOS VALORES DE LAS CONSTANTES SON:"
      DISPLAY (BR(I,W),I=1,OR)
```

PAGE 0003

```
C       ESCRIBE LOS VALORES DE LAS CONSTANTES DE LA FUNCION
        WRITE(6,29)N
     29 FORMAT(10X,///,'EL POLINOMIO DE GRADO ',I1,' ES:',///)
        DO 91 J=1,OR
        NE=J-1
        DISPLAY AR(J,W),"X**",NE,"+"
     91 CONTINUE
        STOP
        END
```

PROGRAM UNIT MAIN' COMPILED

```
      SUBROUTINE ORDENADOR(OR,N,L,C,CACHO)
      DIMENSION CACHO(8,9),VEC(8)
      INTEGER C
      XMAX=ABS(CACHO(L,C))
      MAX=L
      DO 15 J=L+1,OR
      IF(ABS(CACHO(J,C)).LE.XMAX)GO TO 15
      XMAX=ABS(CACHO(J,C))
      MAX=J
   15 CONTINUE
      DO 25 I=1,N
      VEC(I)=CACHO(MAX,I)
      CACHO(MAX,I)=CACHO(L,I)
      CACHO(L,I)=VEC(I)
   25 CONTINUE
      RETURN
      END
```

PROGRAM UNIT ORDENADOR COMPILED

```
PAGE 0005   HEWLETT-PACKARD 32102B.01.01   FORTRAN/3000   FRI, MAR 14, 1980,  2:50 PM

      SUBROUTINE ERROR(C1,VE,C2,ERR)
      ER=0.00001
      ERR=0.0
      IF(C1-(VE*C2).EQ.0.0)GO TO 15
      IF(ABS(ER/(C1-(VE*C2)+ER)).LE.0.0)GO TO 15
      ERR=ERR+1.0
   15 RETURN
      END

PROGRAM UNIT ERROR COMPILED
```

```
DATOS: M,N
    10     4
DATOS X Y EN OTRO RENGLON LOS Y
 2.00000     5.00000     8.00000     11.0000     14.0000     17.0000     27.0000     31.0000     35.0000     44.0000
 94.8000     87.9000     81.3000     74.9000     68.7000     64.0000     49.3000     40.0000     39.1000     31.6000
SUMATORIA DE LAS X ELEVADAS
 10.0000     194.000     5550.00     187166.     .684500E+07 .262571E+09 .100032E+11 .422128E+12 .178441E+14
SUMATORIA DE LOS PRODUCTOS
 635.600     9607.20     236103.     .730541E+07 .253420E+09
LA MATRIZ DE LA QUE SE CALCULARAN LAS CONSTANTES        DADA POR RENGLONES ES:
(DONDE CADA RENGLON TIENE  6.00000     DATOS)
 .684500E+07 .262571E+09 .100032E+11 .422128E+12 .178441E+14 .253420E+09 187166.     .684500E+07 .262571E+09 .100032E+11
 .422128E+12 .730541E+07 5550.00     187166.     .684500E+07 .262571E+09 .100032E+11 236103.     194.000     5550.00
 187166.     .684500E+07 .262571E+09 9607.20     10.0000     194.000     5550.00     187166.     .684500E+07 635.600
    LOS VALORES DE LAS CONSTANTES SON:
 100.261     -2.71856    .440963E-01 -.677117E-03 .619329E-05


L POLINOMIO DE GRADO 4 ES:


 100.261     X**     0 +
-2.71856     X**     1 +
 .440963E-01 X**     2 +
-.677117E-03 X**     3 +
 .619329E-05 X**     4 +
```

$P_4(5) = 87.689$

$P_4(14) = 69.224$

$P_4(27) = 48.969$

$P_4(35) = 39.392$

ERRORES CON RESPECTO A LOS DATOS EXPERIMENTALES.

$P_4(5) = 0.24$

$P_4(14) = 0.76$

$P_4(27) = 0.670$

$P_4(35) = 0.746$

$$P_4(t) = A = 100.261 - 2.718x + .440\,E\text{-}01X^2 - .677\,E\text{-}03X^3 + 0.619\,E\text{-}05X^4$$

$$A = 100.261 - 2.718x + 0.0440x^2 - 0.000677x^3 + 0.00000619x^4$$

FORMULAS CON DOS CONSTANTES.

Curvas simples parabólicas o hiperbólicas, $y = ax^b$.

Cuando los puntos marcados se desvían sistemáticamente de una recta, se traza una curva suave que pase muy cerca de los puntos; la forma de la curva o un conocimiento de la naturaleza del experimento pueden darnos una idea sobre la forma de la ecuación que representará mejor los datos.

Las curvas simples que aproximan un gran número de datos empíricos son las parabólicas y las hiperbólicas. La ecuación de una curva tal es $y = ax^b$, parabólica si b es positiva e hiperbólica si b es negativa. En la Fig. (I), se han trazado algunas de estas curvas para a = 2 y b = −2, −1, −0.5, 0.25, 0.5, 1.5, 2. Notar que todas las curvas parabólicas pasan por los puntos (0 , 0)

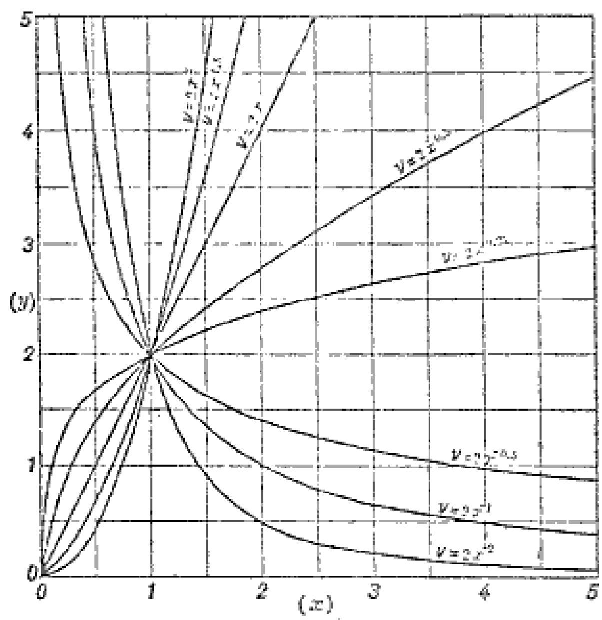


FIG. I

y (1 , a) y que cuando una de las variables aumenta la otra también aumenta. Todas las curvas hiperbólicas pasan por el punto (1 , a) y tienen los ejes coordenados con asíntotas, y cuando una de las variables aumenta la otra disminuye.

Existe un método muy simple para verificar si puede aproximarse un conjunto de datos por una ecuación de la forma $y = ax^b$. Tomando logaritmos en ambos miembros de esta ecuación, obtenemos $\log y = \log a + b \log x$, y si $x' = \log x$, $y' = \log y$, esto se convierte en $y' = \log a + bx'$, una ecuación de primer grado en x' y y'; por tanto, el trazo de (x', y') o de $(\log x, \log y)$ debe aproximar una recta. Entonces, Si un conjunto de datos puede representarse aproximadamente por una ecuación de la forma $y = ax^b$, entonces el trazo de $(\log x, \log y)$ aproximará una recta, y ya sabemos como tratar este caso.

En lugar de marcar $(\log x, \log y)$ sobre papel cuadriculado ordinario, podemos marcar (x, y) directamente sobre papel logarítmico. Determinamos las constantes a y b por la ecuación de la recta y por algún Método de los ya conocidos. (Ejemplo: mínimo cuadrado).

EJEMPLO 1. La tabla siguiente da el número de gramos S de cloruro de amonio anhidro que disueltos en 100 gramos de agua hacen una solución saturada para θ° de temperatura absoluta.

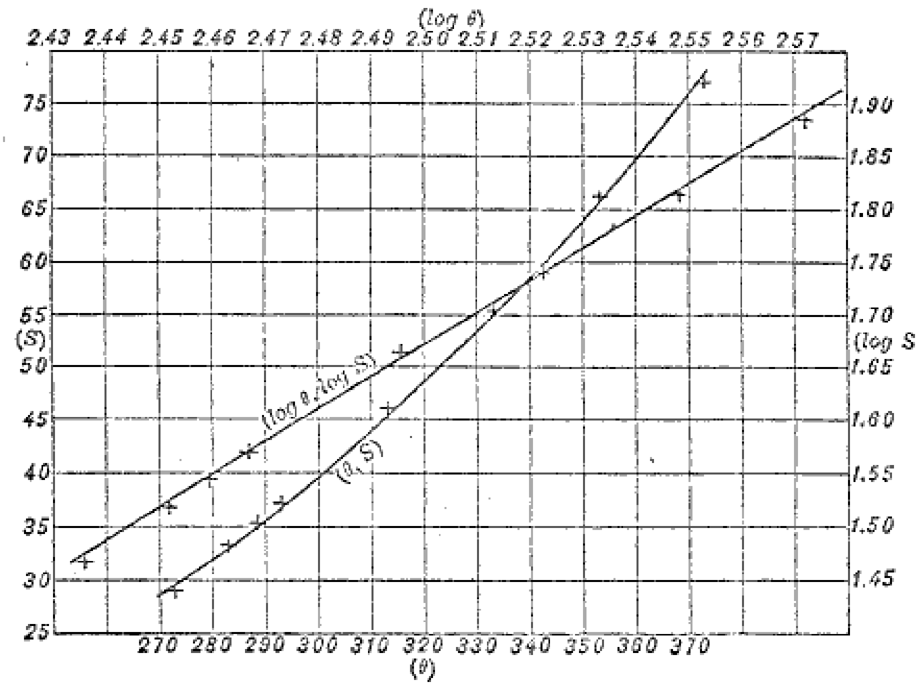


FIG. II

θ	S	logθ	logS	S_c^{I}	S_c^{II}	Δ I	Δ II
273	29.4	2.4662	1.4684	29.7	29.7	-0.3	-0.3
283	33.3	2.4518	1.5224	33.2	33.2	+0.1	+0.1
288	35.2	2.4594	1.5465	35.0	35.1	+0.2	+0.1
293	37.2	2.4669	1.5705	37.0	37.0	+0.2	+0.2
313	45.8	2.4955	1.6609	45.3	45.3	+0.5	+0.5
333	55.2	2.5224	1.7419	54.9	54.9	+0.3	+0.3
353	65.6	2.5478	1.8169	65.7	65.8	-0.1	-0.2
373	77.3	2.5717	1.8882	77.9	78.0	-0.6	-0.7
						8 = 0.29	0.30

Los puntos (θ , S) están marcados en la Fig. II. La curva parece ser parabólica, p.ej., de la forma general ilustrada en la Fig. I. Trazamos entonces - ($\log \theta$, $\log S$) y notamos que aproxima una recta, así que podemos suponer

$$S = a\theta^{b} \text{ ó } \log S = \log a + b \log \theta.$$

Determinaremos primero las constantes por el método denominado de puntos - escogidos. Que consiste en notar dos puntos sobre la línea cuyas coordenadas sean por ejemplo:

$$\log\theta = 2.445, \log S = 1.50 \quad y \quad \log\theta = 2.555, \log S = 1.84,$$

de donde resulta

$$1.50 = \log a + 2.445b,$$
$$1.84 = \log a + 2.555b.$$

$$b = 3.09, \log a = -6.0550 = 3.9450 - 10, a = 0.000,000,881.$$

$$\log S = -6.0550 + 3.09 \log\theta, \quad o \quad S = 0.000,000,881\ \theta^{3.09}.$$

Ahora determinemos las constantes por el método conocido como de promedios. Que consiste en dividir los datos en dos grupos de cuatro conjuntos (no necesariamente cuatro) y, sumando, tenemos

$$6.1078 = 4\log a + 9.8143b,$$
$$7.1079 = 4\log a + 10.1374b.$$

$$b = 3.09, \log a = -6.0546 = 3.9454 - 10, a = 0.000000882.$$

$$\log S = -6.0546 + 3.09 \log\theta \quad o \quad S = 0.000000882\ \theta^{3.09}.$$

Completamos la tabla calculando S, los residuos, y los residuos promedios. - Es bastante bueno el acuerdo entre los valores de S observados y calculados.

EJEMPLO 2. La tabla siguiente da la presión p, en libras por pulgada cuadrada, del vapor seco saturado que corresponde a un volumen v, en pies cúbicos - por libra. (Tomado de Elementary Practical Mathematics, de Perry.)

v	p	log v	log p	p_c	Δ
53.92	6.86	1.7318	0.8363	6.85	+ 0.01
26.36	14.70	1.4210	1.1673	14.69	+ 0.01
14.00	28.83	1.1461	1.4599	28.85	− 0.02
6.992	60.40	0.8446	1.7810	60.49	− 0.09
4.280	101.9	0.6314	2.0082	102.1	− 0.2
2.748	163.3	0.4390	2.2130	163.7	− 0.4
1.853	250.3	0.2679	2.3984	249.2	+ 1.1

Los puntos (v, p) están marcados en la Fig. III. Al compararla con la Fig. I, la curva parece ser hiperbólica. Entonces,

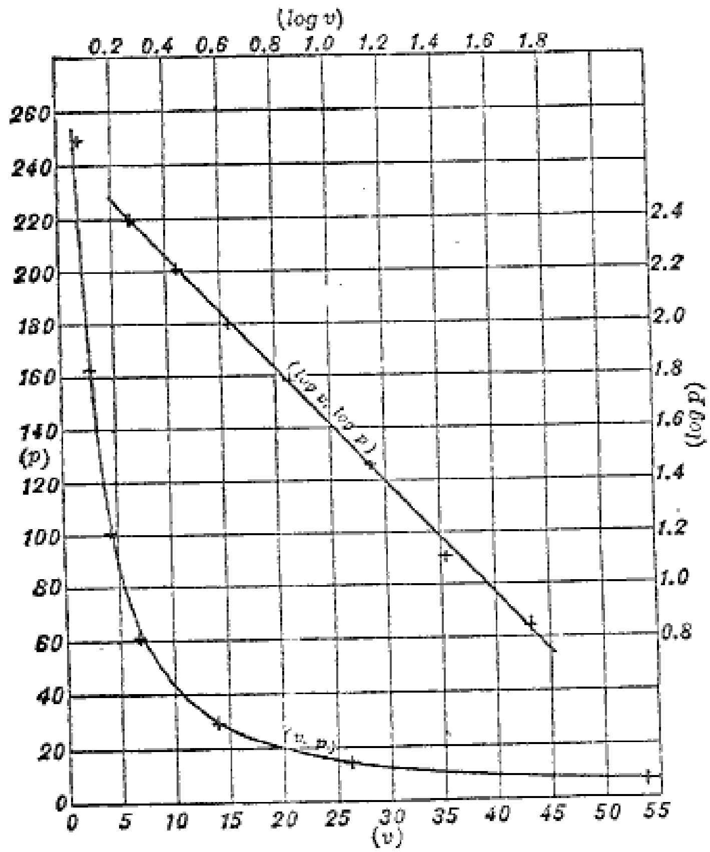


FIG. III

marcamos (log v, log p) y notamos que aproxima una recta, de manera que podemos suponer

$$p = av^b, \quad \text{o} \quad \log p = \log a + b \log v.$$

Usaremos el método de promedios para determinar las constantes a y b. Separando los datos en dos grupos, el primero con cuatro y el segundo con tres conjuntos, y sumando, resulta

$$5.2445 = 4 \log a + 5.1435\, b,$$
$$6.6196 = 3 \log a + 1.3383\, b.$$

$b = -1.0662$, $\log a = 2.6822$, $a = 481.1$.

$\log p = 2.6822 - 1.0662 \log v$, o $pv^{1.0662} = 481.1$.

Calculamos en seguida p y y notamos la estrecha concordancia entre los valores observados y calculados.

Curvas exponenciales simples, $y = ae^{bx}$.

Otras curvas simples que aproximan un gran número de resultados experimentales son las exponenciales o logarítmicas. Una ecuación de una curva tal puede escribirse en la forma $y = ae^{bx}$, donde e es la base de los logaritmos naturales; se usa a veces la forma $y = ab^{x}$. En la Fig. 1 se ha trazado algunas de estas curvas para a = 1

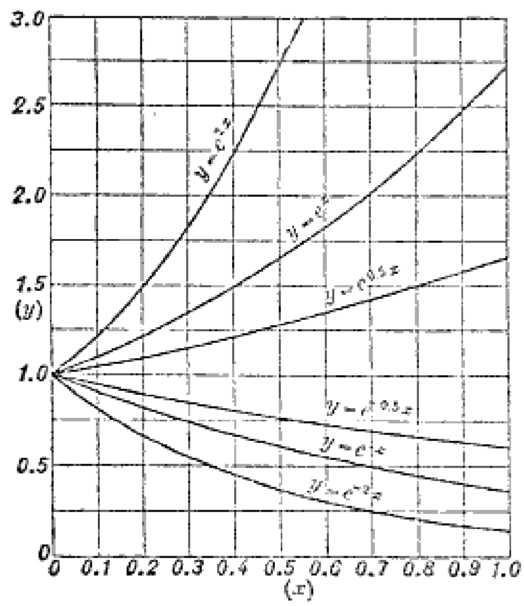


FIG. 1

y b = −2, −1, −0.5, 0.5, 1, 2. Notar que todas estas curvas pasan por el punto (0 , a) y tienen el eje x como asíntota.

Existe un método muy simple para verificar si puede aproximarse un conjunto de datos por una ecuación de la forma $y = ae^{bx}$. Tomando logaritmos en ambos miembros de la ecuación, resulta $\log y = \log a + (b \log e)\, x$, y si $y' = \log y$ esta ecuación se transforma en $y' = \log a + (b \log e)\, x$, una ecuación de primer grado en x y y'; entonces el trazo de (x, y') o de $(x, \log y)$ debe aproximar una recta. — Por tanto,

Si un conjunto de datos puede representarse aproximadamente por una ecuación de la forma $y = ae^{bx}$, entonces el trazo de $(x, \log y)$ aproxima una recta.

En lugar de marcar $(x, \log y)$ sobre papel cuadriculado ordinario, podemos marcar (x, y) directamente sobre papel semilogarítmico. Las constantes a y b se determinan por la ecuación de una recta por uno de los métodos descritos anteriormente.

EJEMPLO. Los experimentos químicos de Harcourt y Esson dieron los resultados de la tabla que sigue, donde A es la cantidad de substancia remanente en una reacción, después de un intervalo de tiempo t.

t	A	log t	log A	A_c	Δ
2	94.8	0.3010	1.9768	94.9	− 0.1
5	87.9	0.6990	1.9440	87.7	+ 0.2
8	81.3	0.9031	1.9101	81.0	+ 0.3
11	74.9	1.0414	1.8745	74.8	+ 0.1
14	68.7	1.1461	1.8370	69.1	− 0.4
17	64.0	1.2304	1.8062	63.8	+ 0.2
27	49.3	1.4314	1.6928	49.0	+ 0.3
31	44.0	1.4914	1.6435	44.1	− 0.1
35	39.1	1.5441	1.5922	39.6	− 0.5
44	31.6	1.6435	1.4997	31.2	+ 0.4

$\Sigma\Delta \div 10 = 0.26$

Los puntos (t, A) están marcados en la Fig. 2. Esta curva parece ser exponencial, de manera que marcanos $(t, \log A)$ y $(\log t, A)$; se ve que el trazo de $(t, \log A)$ aproxima una recta. Podemos suponer entonces una ecuación de la forma

o $\qquad A = ae^{bt}$ o $\log A = \log a + (b \log e)\, t.$

Usaremos el método de los promedios para determinar las constantes. Separamos estos datos en dos grupos y sumando, resulta

$$9.5424 = 5 \log a + 40 (b \log e),$$
$$8.2344 = 5 \log a + 154 (b \log e).$$

$\therefore$ $b \log e = -0.0115$, $\log a = 2.005$.

$\therefore$ $b = -0.0265$, $a = 100.1$, puesto que $= 0.4343$.

$\therefore$ $\log A = 2.0005 - 0.0115\, t$, o $A = 100.1\, e^{-0.0265t}$.

Calculamos ahora los valores de A y los residuos, y notamos el estrecho acuerdo entre los valores de A observados y calculados.

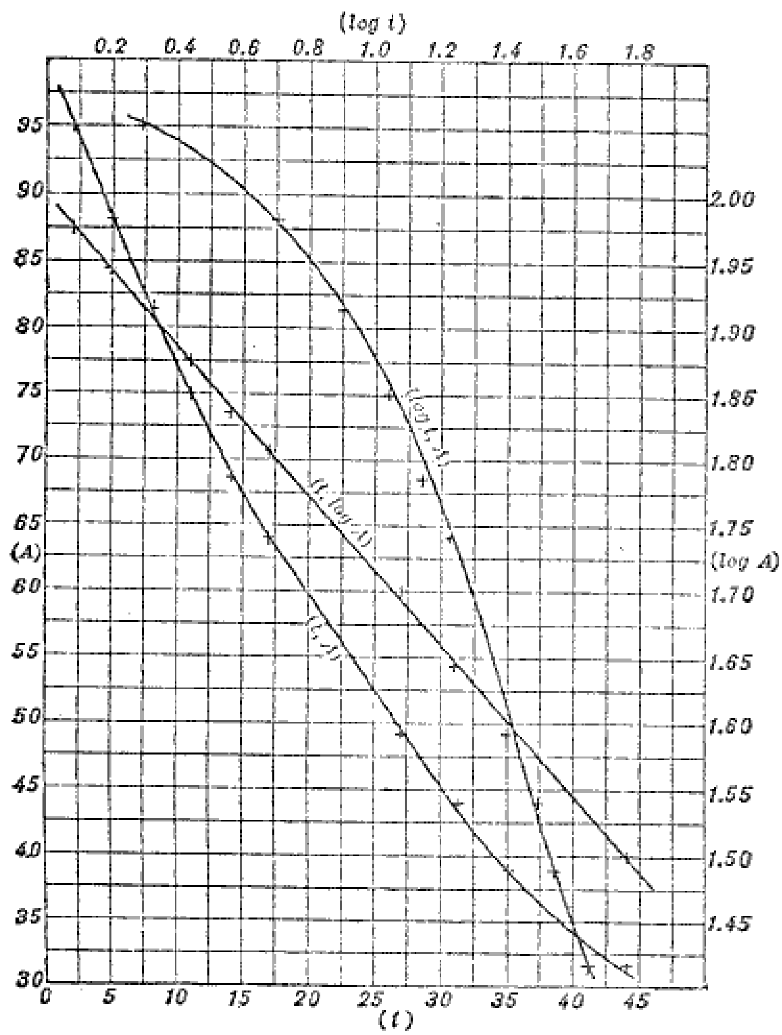


FIG. 2

EJEMPLO 2. La tabla siguiente da los resultados de medir la conductividad eléctrica del vidrio a temperaturas de θ° Fahrenheit.

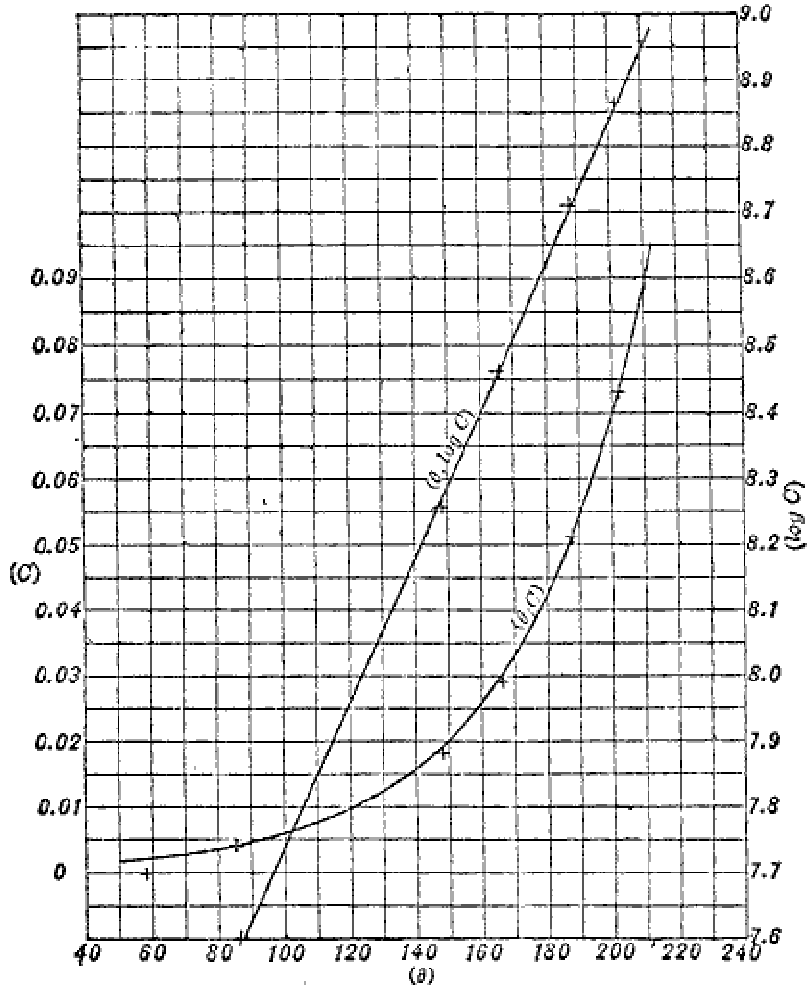


FIG. 3

θ	C	log θ	log C	C_c	A
58	0	1.7634	− ∞	0.0019	
86	0.004	1.9345	7.6021−10	0.0039	+0.0001
148	0.018	2.1703	8.2553−10	0.0185	−0.0005
166	0.029	2.2201	8.4624−10	0.0292	−0.0002
188	0.051	2.2742	8.7076−10	0.0510	0
202	0.073	2.3054	8.8633−10	0.0728	+0.0002
210	0.090	2.3222	8.9542−10	0.0891	−0.0010

En la Fig. 3, están marcados los puntos (θ, C) y $(\theta, \log C)$; los últimos parecen quedar en línea recta. Podemos entonces suponer la ecuación

$$C = ae^{b\theta}, \quad \text{o} \quad \log C = \log a + (b \log e)\,\theta.$$

Usamos el método de los promedios para determinar las constantes. Omitiendo el primer conjunto y separando los datos restantes en dos grupos de tres conjuntos, obtenemos

$$24.3198 - 30 = 3 \log a + 400\,(b \log e),$$
$$26.5251 - 30 = 3 \log a + 600\,(b \log e).$$

$$\therefore\ b \log e = 0.0110, \quad \log a = 6.6399 - 10.$$

$$\therefore\ b = 0.0253, \qquad a = 0.000436.$$

$$\log C = 6.6399 - 10 + 0.0110\,\theta, \quad \text{o} \quad C = 0.00436\, e^{0.0253\,\theta}.$$

Calculamos ahora los valores de C y los residuos y notamos la extraordinaria coincidencia entre los valores de C observados y calculados.