Tecnología, Ciencia, Educación
ISSN: 0186-6036
imiqac@sercom.com.mx
Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos A.C
México

Castillo Maldonado, José Cruz

Minimorum, programa para ajustar ecuaciones a aseries de datos por el método de los mínimos cuadrados

Tecnología, Ciencia, Educación, vol. 19, núm. 2, julio-diciembre, 2004, pp. 65-68
Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos A.C
Monterrey, México

Disponible en: http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=48219204

Cómo citar el artículo
Número completo
Más información del artículo
Página de la revista en redalyc.org

Sistema de Información Científica
Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal
Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

Tecnol. Ciencia Ed. (IMIQ)19(2): 65-68, 2004

Minimorum, programa para ajustar ecuaciones a series de datos por el método de los mínimos cuadrados

*José Cruz Castillo-Maldonado**

Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria, 58060 Morelia, Mich., México Tel. (+52-443) 316 7176
Correo electrónico (e-mail): jcruzc@zeus.umich.mx

RESUMEN

El programa «Minimorum», para ajustar ecuaciones a series de datos experimentales, se desarrolló teniendo como objetivos: facilidad de aprendizaje y operación, accesibilidad para profesores y estudiantes, facilitar el análisis y establecimiento de las ecuaciones, facilitar la estimación de variables interactivamente y producir archivos compatibles con software comercial. Existen aplicaciones comerciales que alcanzan y rebasan las expectativas de muchos usuarios; sin embargo, es deseable contar con un apoyo de cómputo más sencillo y confiable a fin de poder validar rápidamente el modelo propuesto o modificarlo. Cabe mencionar que este programa se desarrolló en Visual Basic 6.0 porque con este lenguaje se aprovechan las facilidades del sistema operativo de mayor uso, Windows 9x a Xp. El método de ajuste empleado en Minimorum es el de los mínimos cuadrados, que ha probado históricamente su eficacia debido al principio de probabilidad y estadística que lo sustenta. La introducción de datos se realiza mediante una retícula similar a las hojas de cálculo, lo cual facilita tanto la operación como el aprendizaje. En la pantalla se puede ver la curva obtenida, imprimirla o guardar los datos como archivo de Excel. La ventana de la gráfica permite realizar estimaciones interactivas de las variables. Quienes han utilizado el programa manifiestan que ha sido fácil aprender a usarlo y consideran que es ventajoso en cuanto al tiempo empleado y facilidad de interpretación de los resultados, lo cual cumple con los objetivos planteados.

Palabras clave: Ajuste de ecuaciones, mínimos cuadrados, estimaciones interactivas

Keywords: Equations fitting, least squares, interactive estimations

INTRODUCCIÓN

Se reconoce que, para ajustar ecuaciones a series de datos experimentales, existen muchas aplicaciones comerciales que alcanzan y rebasan las expectativas de la mayoría de los usuarios; sin embargo, en muchos casos sería preferible contar con un apoyo de cómputo más sencillo y confiable, a fin de obtener, lo más ágilmente posible, conclusiones respecto a la idoneidad del modelo de correlación propuesto y validarlo o modificarlo en su caso.

Por otro lado, cabe mencionar que los programas en las paqueterías computacionales, especialmente la conocida como Visual Basic 6.0, son lenguajes que desarrollan aplicaciones basadas en el sistema operativo de mayor uso en la actualidad, Windows 9x a Xp, con lo cual su operación resulta más familiar para los usuarios, especialmente los estudiantes de alguna rama de la ingeniería y, en especial, de los estudiantes de ingeniería química.

El método de los "Mínimos Cuadrados"

Aunque existen muchas maneras de obtener los coeficientes de ecuaciones polinomiales para representar series de datos, este método ha probado su eficacia históricamente, debido al principio de probabilidad y estadística en que se basa.

Considerando que, para obtener los coeficientes de un polinomio de grado *n* sería suficiente resolver *n+1* ecuaciones simultáneas puede aplicarse la ecuación polinomial a *n+1* datos conocidos. Esto significa que parábola tres datos, etc. Un método equivalente a resolver las ecuaciones simultáneas es el método de Lagrange. Si se adoptara ese método, entonces se presentaría el problema de tener que elegir de una serie de datos experimentales los *n+1* datos que garantizaran el mejor ajuste de un polinomio de grado *n*. Esta elección tendría cierta incertidumbre y, por otro lado, los coeficientes así obtenidos producirían una curva que pasaría exactamente por los datos empleados, lo cual puede no ser adecuado ya sea por los errores inherentes a los datos o bien porque se obtenga una curva que no pueda servir para una manipulación posterior con el cálculo diferencial e integral. Estos inconvenientes se superan si se emplea un método que considere un mayor número de datos y que permita obtener una curva que represente mejor la tendencia de los datos; aunque no pase exactamente por todos los puntos empleados para obtenerla.

El método de los mínimos cuadrados se basa en el principio de probabilidad y estadística que establece que "*Para una serie de valores de la misma precisión, el mejor o más probable valor es aquél para el cual la suma de los cuadrados de los errores es la mínima*".

Para deducir las fórmulas de cálculo de los coeficientes, puede suponerse que se desea ajustar una ecuación de segundo grado a *n* datos. Esta elección permite una solución fácil del sistema de ecuaciones sin afectar la generalidad de los resultados. Cada valor de la variable dependiente se expresaría como (Chapra y Canale, 2003):

$$y=a+bx+x^2 \qquad (1)$$

para los *n* datos, se tiene:

$$y_1 = a + bx_1 + cx_1^2, \ldots\ y_i = a + bx_i + cx_i^2 \text{ hasta } y_n = a + bx_n + cx_n^2, \qquad (2)$$

el error en la predicción de *y* para cada valor de *x* sería:

$$e_i = a + bx_i + cx_i^2 - y_i \qquad (3)$$

la suma de los cuadrados de los errores, para los n datos:

$$\sum(a+bx_i+cx_i^2-y_i)^2=F(a,b,c) \qquad (4)$$

Derivando F respecto a *a, b* y *c* e igualando a cero, se obtiene el mínimo de esta función y las ecuaciones para *a, b* y *c*:

$$na+b\sum x+c\sum x^2=\sum y \qquad (5)$$

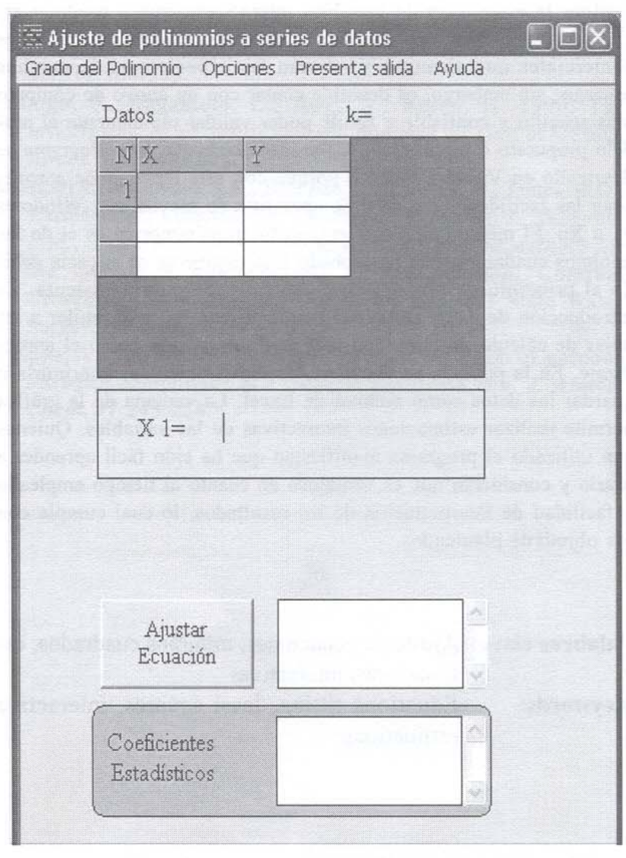
$$a\sum x+b\sum x^2+c\sum x^3=\sum xy \qquad (6)$$

$$a\sum x^2+b\sum x^3+c\sum x^4=\sum x^2y \qquad (7)$$

una vez calculadas las sumatorias, el programa "Minimorum" resuelve este sistema de ecuaciones simultáneas por el método de Gauss.

Cómo funciona el programa Minimorum

Primero se introducen los datos en la cuadrícula. Para esto bastará con teclear la cantidad en la línea de edición, que se encuentra al pie de la tabla. Se pueden emplear las teclas de edición usuales; Supr, Back, Ins, antes de pulsar la tecla Enter. Para terminar una entrada se pulsa la tecla Enter y el cursor avanza a la siguiente celda. Cuando sea necesario, conforme aumente el número de datos, aumentará el número de renglones disponibles (Figura 1).



Si desea modificar algún dato, deberá hacer click sobre la celda correspondiente, una vez terminada la edición, al pulsar Enter, el cursor avanza igual que al introducir los datos por primera vez. Cuando se pulse el botón **Ajustar Ecuación**, la cuadrícula se recortará hasta donde haya una celda de la columna X en blanco. Las celdas de la columna Y que hayan quedado en blanco originarán un mensaje para confirmar si el dato es 0 (cero).

Para ajustar la ecuación a los datos tal y como fueron asentados, se indica primero el grado del polinomio en el menú **Grado del polinomio** y enseguida se pulsa el botón **Ajustar Ecuación** (Figura 2).

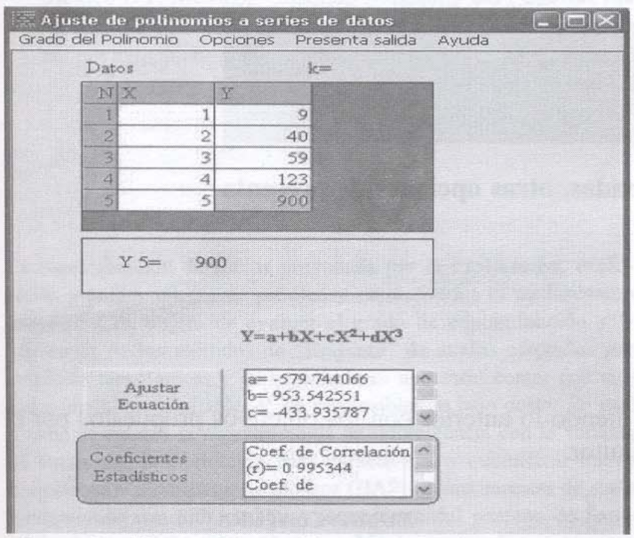
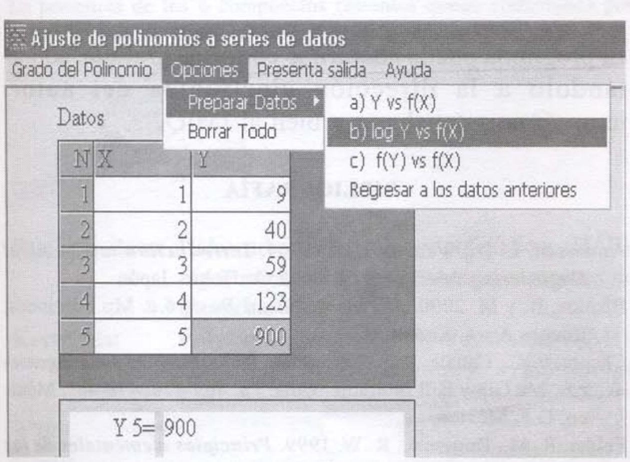


Figura 2. Ajustar Ecuación

Se pueden emplear algunas expresiones de X y/o de Y , como variables, entonces en el menú **Opciones** elegir **preparar datos** (Figura 3), que ofrece tres alternativas:



Y como una función de una expresión de X
log Y como una función de una expresión de X
Una expresión de Y en función de una expresión de X [f(Y) vs f(X)]

El último cambio que se haga puede revertirse mediante la opción **Regresar a los datos anteriores** del submenú preparar datos.

Antes de pulsar el botón **Ajustar Ecuación** se especifica el grado del polinomio, en el menú correspondiente.

Después de ajustar la ecuación se despliegan; la forma genérica de la ecuación obtenida, los valores de sus coeficientes, el Coeficiente de Correlación y el Coeficiente de Determinación.

Para presentar una gráfica de la ecuación, en el menú **Presenta salida** seleccionar **Gráfica en pantalla**, a continuación especificar el intervalo de valores de la variable independiente y el incremento o separación entre subdivisiones.

Se desplegará una gráfica y un cuadro de diálogo solicitando el **Título** de la misma.

Si el origen, coordenadas 0,0, queda dentro del área de la gráfica, se mostrará un círculo pequeño en el cruce de los ejes. Estando desplegada la gráfica, con el cursor manual (conocido como "ratón" o "*mouse*", en la jerga computacional), se puede hacer "*clic*" sobre ella para obtener las **coordenadas (X, Y)** del punto señalado o solamente el valor de **X** si no está sobre un punto de la curva (Figura 4).

Para imprimir la gráfica bastará con seleccionar **Imprimir**, de la barra de menús y elegir el modo de impresión: Negro o Colores. La calidad del impreso depende de la resolución que utilice el monitor.

Para probar otro ajuste se puede borrar la curva, eligiendo **Borrar solo la gráfica actual** y se presentará nuevamente la barra de menús original, de manera que pueda, con los mismos datos, ensayar diferentes ajustes. También podrá **Borrar Todo**, para iniciar un nuevo análisis.

Para facilitar el análisis y la comparación de la curva con los datos de origen, estando la gráfica visible, se puede elegir **Marcar los datos,** si están dentro del intervalo ("rango" por el anglicismo usado incorrectamente de "*range*" en vez de "*rank*") de la gráfica, **con círculos, con cruces** o círculos cruzados si se aplican ambas opciones.

Se pueden **Grabar** los datos, con los que se obtuvo un ajuste, en una **Hoja de Cálculo** del paquete computacional **Excel**, ya sea desde el menú principal o bien cuando esté la gráfica a la vista, seleccionando el menú **Grabar Hoja Excel**. Un cuadro de diálogo pedi-

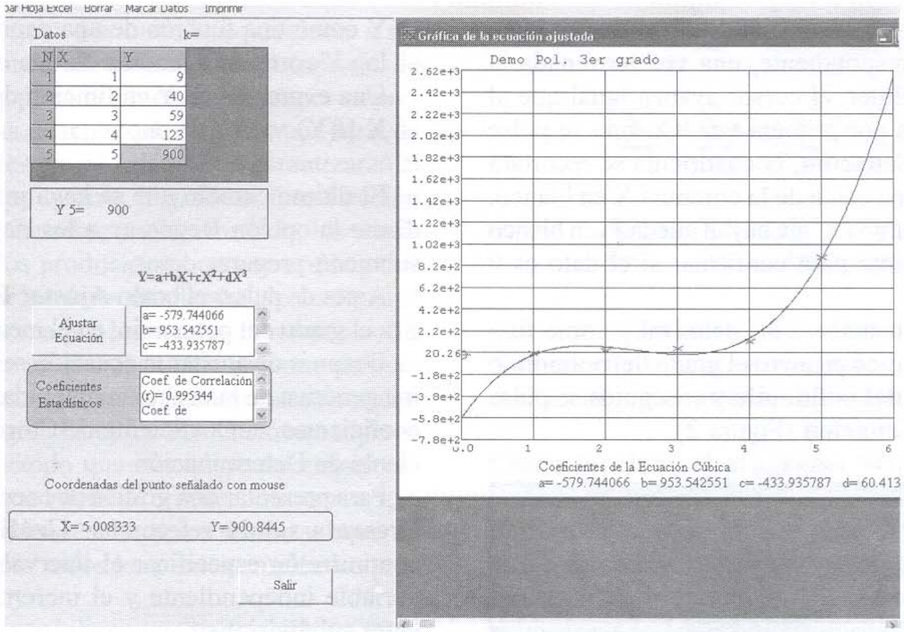


Figura 4. Gráfica en pantalla, coordenadas, otras opciones de presentación de resultados

archivo quedará guardado en el subdirectorio o carpeta **Datos,** dentro de la carpeta donde está el programa **Minimorum**.

En caso de que no sea posible grabar una Hoja de Cálculo de Excel, se grabará un archivo de texto, que puede ser leído por Excel para lo cual se pedirá nuevamente el nombre del archivo.

Se puede obtener una explicación de cómo funciona "Minimorum", en la barra de menús de la ventana principal.

CONCLUSIONES

El tiempo y esfuerzo invertidos para desarrollar "Minimorum" justifican realizar una evaluación sistemática, tanto entre estudiantes y maestros de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, alma mater del autor, y del Instituto Tecnológico de Morelia, institución cercana geográficamente; sin embargo, a través de esta publicación y la presentación oral en la Convención Nacional del Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos, puede adelantarse que quienes han utilizado el programa han manifestado que lo encuentran fácil de aprender y consideran que lo podrán utilizar con beneficios directos en cuanto a tiempo y diendo lo anterior con los objetivos propuestos por el autor.

NOMENCLATURA

x_i	valor iésimo de la variable independiente
y_i	valor iésimo de la variable dependiente
n	número de datos que se procesan
$a, b, c,...$	coeficientes del polinomio que se ajusta

DISPONIBILIDAD DEL PROGRAMA

El programa puede adquirirse en forma gratuita, solicitándolo a la dirección electrónica del autor: jcruzc@zeus.umich.mx o bien al IMIQ.

BIBLIOGRAFÍA

Andersen, L. B., Wenzel, L. A. 1961. ***Introduction to Chemical Engineering***. McGraw-Hill Book Co. Tokio, Japón.

Birnios, B. y M. 2000. ***Microsoft Visual Basic 6.0.*** Mp Ediciones, Buenos Aires, Argentina.

Chapra, S. C., Canale, R. P. 2003. ***Métodos numéricos para ingenieros.*** Mc Graw Hill Interamericana, Pp. 469-470, 478-481. México, D.F. México.

Felder, R. M., Rousseau, R. W. 1999. ***Principios elementales de los***