UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
DIVISIÓN DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DPTO. TERMODINÁMICA Y FENÓMENOS DE TRANSFERENCIA
MÉTODOS APROXIMADOS EN ING. QUÍMICA
TF-1313

APROXIMACION MULTIFUNCION Y MULTIVARIABLE MULTIFUNCION

Esta guía fue elaborada por:

Prof. Aurelio Stammitti Scarpone

con la ayuda de:

Br. María M. Camacho A.

APROXIMACION MULTIFUNCION Y MULTIVARIABLE MULTIFUNCION

El objetivo es aproximar una tabla de datos *x*-*y* con una función de la siguiente forma:

$$f(x) = a_0 . f_0(x) + a_1 . f_1(x) + a_2 . f_2(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j . f_j(x)$$

Esto es, una combinación lineal de funciones $f_j(x)$ que deben ser linealmente independientes entre sí.

La definición del error local es:

$$e_i = y_i - f(x_i) = y_i - \left(\sum_{j=0}^{m} a_j . f_j(x) \right)$$

El error total cuadrático es:

$$E = \sum_{i=0}^{n} e_i^2$$

donde n es el número de puntos -1 en la tabla (esto es porque empieza en i=0).

Igualmente, se debe minimizar el error E buscando los coeficientes a_j apropiados que cumplan con:

$$\frac{\partial E}{\partial a_j} = 0 \qquad \forall_j = 0, ..., n$$

Haciendo el tratamiento matemático se llega a un sistema de ecuaciones de esta forma:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i)\cdot f_0(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i)\cdot f_1(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i)\cdot f_2(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i)\cdot f_0(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i)\cdot f_1(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i)\cdot f_2(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} f_2(x_i)\cdot f_0(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_2(x_i)\cdot f_1(x_i) & \sum_{i=0}^{n} f_2(x_i)\cdot f_2(x_i) \end{pmatrix}}_{M} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_0(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_1(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_2(x_i) \end{pmatrix}}_{\overline{b}}$$

Sistema final: $M \cdot \overline{a} = \overline{b}$

Se puede resolver por cualquier método para sistemas lineales y el resultado son los coeficientes a_j que acompañan a las funciones $f_j(x)$.

Ejemplo:

Ajustar la tabla a la siguiente función: $f(x) = a_0.\cos(x) + a_1.sen(x)$

Entonces: $f_0(x) = \cos(x)$ y $f_1(x) = sen(x)$

x	**y**	**f_0(x)**	**f_1(x)**	**$f_0 \cdot f_0$**	**$f_0 \cdot f_1$**	**$f_1 . f_1$**	**$y \cdot f_0$**	**$y \cdot f_1$**
0	2	1	0	1	0	0	2	0
0,25	2,0966	0,9.689	0,2474	0,9388	0,2397	0,06121	2,0314	0,5187
0,47	2,1489	0,8916	0,4529	0,7950	0,4083	0,2051	1,9160	0,9732
0,77	2,1458	0,7179	0,6961	0,5154	0,4997	0,4846	1,5405	1,4937
1,02	2,09	,05234	0,8521	0,2739	0,4460	0,7261	1,0939	1,7809
1,23	1,8730	0,3342	0,9425	0,1117	0,31450	0,8883	0,6260	1,7653
1,51	1,4593	0,06076	0,9982	0,00369	0,06065	0,9964	0,0886	1,4567
			Σ	3,6385	2,5152	3,3617	9,2965	7,9885

Comentario: lo mejor es hacerlo así en forma de tabla para hacer todas las evaluaciones juntas.

El sistema a resolver es:

$$\begin{pmatrix} \sum f_0 \cdot f_0 & \sum f_0 \cdot f_1 \\ \sum f_1 \cdot f_0 & \sum f_1 \cdot f_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y \cdot f_0 \\ \sum y \cdot f_1 \end{pmatrix} \Rightarrow M \cdot \overline{a} = \overline{b}$$

Sustituyendo los valores nos queda:

$$\begin{pmatrix} 3,6385 & 2,5152 \\ 2,5152 & 3,3617 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9,2965 \\ 7,9885 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix} a_0 = 1,8897 \\ a_1 = 0,9625 \end{matrix}$$

Por lo que la función resulta de la forma:

$$f(x) = 1,8897 \cdot \cos(x) + 0,9625 \cdot sen(x)$$

El ajuste se mide con la definición de R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n} (f(x_i) - y_i)^2}{\left(\sum_{i=0}^{n} y_i^2\right) - \frac{1}{N}\left(\sum_{i=0}^{n} y_i\right)^2}$$

OJO:
Esta definición es diferente a la de MS Excel®.

donde N es el número total de puntos.

Para el ejemplo el ajuste se obtiene metiendo los siguientes valores en la fórmula:

$$\sum y_i = 13{,}8136$$
$$\sum y_i^2 = 27{,}6237$$
$$\sum (f(x_i) - y_i)^2 = 0{,}3658$$
$$N = 7$$

el ajuste que da es de: $R^2 = -0{,}0038$.

Observación: este caso particular demuestra que el ajuste es bastante malo con las funciones seleccionadas. Graficando los puntos *x*-*y* y la curva *f*(*x*) se puede ver claramente esto.

Multivariable (*z*-*x*-*y*)

Ahora se tiene una serie de datos *z*-*x*-*y* y se requiere ajustar a una función de la forma:

$$f(x,y) = a_0 . f_0(x,y) + a_1 . f_1(x,y) + a_2 . f_2(x,y) = \sum_{j=0}^{m} a_j . f_j(x,y)$$

De la misma forma que antes para el caso *x*-*y*, es una combinación lineal de funciones independientes.

Se sigue el mismo tratamiento de los errores y se llega a un sistema lineal muy similar al anterior, pero ahora las funciones f_j tienen dos variables.

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i,y_i).f_0(x_i,y_i) & \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i,y_i).f_1(x_i,y_i) & \sum_{i=0}^{n} f_0(x_i,y_i).f_2(x_i,y_i) \\ \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i,y_i).f_0(x_i,y_i) & \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i,y_i).f_1(x_i,y_i) & \sum_{i=0}^{n} f_1(x_i,y_i).f_2(x_i,y_i) \\ \sum_{i=0}^{n} f_2(x_i,y_i).f_0(x_i,y_i) & \sum_{i=0}^{n} f_2(x_i,y_i).f_1(x_i,y_i) & \sum_{i=0}^{n} f_2(x_i,y_i).f_2(x_i,y_i) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_0(x_i,y_i) \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_1(x_i,y_i) \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \cdot f_2(x_i,y_i) \end{pmatrix}$$

Igualmente si se resuelve el sistema por cualquier método y se hallan los coeficientes a_j.

<u>Ejemplo</u>:

Ajustar la tabla de datos z-x-y a la siguiente función: $f(x,y) = a_0.\ln(y + x^2) + a_1.\cos(x + y)$

Entonces: $f_0(x,y) = \ln(y + x^2)$ y $f_1(x,y) = \cos(y + x)$

x	y	z	$f_0(x)$	$f_1(x)$	$f_0 \cdot f_0$	$f_0 \cdot f_1$	$f_1 . f_1$	$z \cdot f_0$	$z \cdot f_1$
-5	1,030	1,418	3,259	-0,676	10,623	-2,203	0,457	4,622	-0,913
-4	1,041	-6,811	2,836	-0,983	8,041	-2,789	0,967	-19,314	6,503
-3	1,057	3,645	2,308	-0,364	5,328	-0,839	0,132	8,413	-1,173
-2	1,080	19,440	1,625	0,606	2,642	0,985	0,367	31,596	11,660
-1	1,105	23,170	0,744	0,994	0,554	0,740	0,989	17,248	22,660
0	1,118	11,044	0,111	0,438	0,012	0,049	0,192	1,227	3,997
1	1,105	-6,550	0,744	-0,509	0,554	-0,379	0,259	-4,876	3,404
2	1,080	-11,855	1,625	-0,998	2,642	-1,622	0,996	-19,268	12,325
3	1,057	-1,569	2,308	-0,609	5,328	-1,407	0,371	-3,621	0,985
4	1,041	18,923	2,836	0,323	8,041	0,915	0,104	53,659	6,165
5	1,030	37,112	3,259	0,968	10,623	3,155	0,937	120,956	32,661
	Σ	87,967	21,657	-0,811	54,387	-3,395	5,772	190,643	98,430

Ahora el sistema a resolver es:

$$\begin{pmatrix} \sum f_0 \cdot f_0 & \sum f_0 \cdot f_1 \\ \sum f_1 \cdot f_0 & \sum f_1 \cdot f_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum z \cdot f_0 \\ \sum z \cdot f_1 \end{pmatrix} \Rightarrow M \cdot \overline{a} = \overline{b}$$

Al sustituir nuestros valores se tiene:

$$\begin{pmatrix} 54,387 & -3,395 \\ -3,395 & 5,772 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 190,643 \\ 98,430 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{matrix} a_0 = 4,744 \\ a_1 = 19,884 \end{matrix}$$

Ahora la función final es:

$$f(x,y) = 4,744 \cdot \ln(y + x^2) + 19,884 \cdot \cos(x + y)$$

Y evaluamos el parámetro R^2 para ver que tal es nuestro ajuste con:

$$\sum_{i=0}^{n} z_i = 87,967$$

$$\sum_{i=0}^{n} z_i^2 = 3019,700$$

$$\sum_{i=0}^{n} (f(x_i, y_i) - z_i)^2 = 11,454$$

$$N = 11$$

Comentario:
Muy buen ajuste!!!

Obteniendo un ajuste de: $R^2 = 0,99506$