CALCULO DE LAS CONSTANTES DE LAS FORMULAS TEORICAS Y EMPIRICAS

Q. Farmacéutico **JUAN RODRIGUEZ REGULI**

INTRODUCCION

Cuando se quiere conocer la relación que une los valores numéricos de dos variables **x** e **y**, se comienza por efectuar una serie de observaciones de donde se obtiene un cuadro de pares de valores correspondientes.

CUADRO I

X	X_1	X_2	X_3	....	Xn
Y	Y_1	Y_2	Y_3	....	Yn

Si a partir de leyes o principios conocidos, puede derivarse una expresión matemática que una los valores de **x** e **y** mediante constantes, éstas podrán determinarse a partir de los datos experimentales del Cuadro precitado.

Las expresiones así obtenidas se denominan **fórmulas teóricas,** para distinguirlas de las **fórmulas empíricas,** que no guardan una relación bien definida con leyes o principios conocidos.

Se ve, pues, claramente que una fórmula teórica es tan rigurosa como una empirica, con la ventaja sobre ésta de su significado teórico.

En el presente trabajo vamos a concretarnos a funciones enteras de primero y segundo grado.

ENUNCIADO DEL PROBLEMA

Supongamos que el Cuadro I es el resultado de una serie de medidas entre dos magnitudes **x** e **y** ligadas por una función lineal del tipo:

$$y = a + bx$$

El problema consiste en determinar **a** y **b** de tal manera que los valores calculados para **y** difieran lo menos posible de los obtenidos experimentalmente, o sea que la recta $y = a + bx$ pase lo más cerca posible de los puntos que proporciona la experiencia.

Si la función es de segundo grado:

$$y = a + bx + cx^2$$

el problema consiste en determinar tres incógnitas: **a, b** y **c,** con la misma condición que antes, es decir, los valores calculados deben diferir lo menos posible de los experimentales.

METODO DE LOS MINIMOS CUADRADOS

De los distintos métodos conocidos para resolver el problema, vamos a tratar solamente el denominado de los mínimos cuadrados, por ser el más exacto.

Consideremos primeramente el caso donde la relación entre **x** e **y** es lineal:

$$y = a + bx \qquad (1)$$

Tenemos pares de valores determinados experimentalmente que ligan a **x** e **y**; queremos determinar **a** y **b** con la condición exigida.
Si se tuviera una exactitud perfecta resultaría que:

$$\begin{aligned} a + bx_1 - y_1 &= 0 \\ a + bx_2 - y_2 &= 0 \\ a + bx_3 - y_3 &= 0 \\ \cdots\cdots & \\ \cdots\cdots & \\ \cdots\cdots & \\ a + bx_n - y_n &= 0 \end{aligned}$$

Pero en la práctica se obtiene:

$$\begin{aligned} a + bx_1 - y_1 &= v_1 \\ a + bx_2 - y_2 &= v_2 \\ a + bx_3 - y_3 &= v_3 \\ \cdots\cdots & \\ \cdots\cdots & \\ \cdots\cdots & \\ a + bx_n - y_n &= v_n \end{aligned}$$

De estos valores de **v** algunos son positivos y otros negativos, pudiendo también ser nulos. Yo quiero que la suma de los valores absolutos de **v** sea mínima; que sean mínimas las desviaciones de los valores obtenidos con respecto a sus correspondientes determinados experimentalmente. Para eso basta con que sea mínima la suma de los cuadrados de **v**.
Es decir que:

$$\sum_{i=1}^{i=n} (v_i)^2 = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 + \ldots v_n^2$$

sea mínima.
O sea que:

$$\sum_{i=1}^{i=n} (a + bx_i - y_i)^2 \qquad (2)$$

sea mínima.

En adelante y para abreviar la escritura, estableceremos que todas las sumaciones son desde $i = 1$ hasta $i = n$.

Para que (2) sea mínima deben ser nulas sus derivadas primeras con respecto a **a** y **b** y positivas las correspondientes derivadas segundas. Se necesita pues, que:

$$\frac{\delta}{\delta a}\sum(a+bx-y)^2=0$$

y

$$\frac{\delta}{\delta b}\sum(a+bx-y)^2=0$$

Pero:

$$\frac{\delta}{\delta a}\sum(a+bx-y)^2=2\sum(a+bx-y)$$

$$\frac{\delta}{\delta b}\sum(a+bx-y)^2=2\sum x(a+bx-y)$$

Por lo tanto se necesita que:

$$\sum(a+bx-y)=0$$

y

$$\sum x(a+bx-y)=0 \qquad (3)$$

A su vez:

$$\frac{\delta^2}{\delta a^2}\sum(a+bx-y)^2=2\frac{\delta}{\delta a}\sum(a+bx-y)=2\sum(1)=2n>0$$

$$\frac{\delta^2}{\delta b^2}\sum(a+bx-y)^2=2\frac{\delta}{\delta b}\sum x(a+bx-y)=2\sum(x^2)>0$$

Por lo tanto las igualdades (3) son las condiciones para el mínimo.

Dado que hay **n** ecuaciones se tiene:

$$n.a+b.\sum(x)-\sum(y)=0$$

$$a.\sum(x)+b.\sum(x^2)-\sum(x.y)=0$$

Todo lo que corresponde al signo de sumación irá entre paréntesis; las igualdades anteriores pueden escribirse así:

$$n.a+\sum(x).b=\sum(y)$$

$$\sum(x).a+\sum(x^2).b=\sum(x.y)$$

Por lo tanto:

$$a=\frac{\sum(x).\sum(x.y)-\sum(x^2).\sum(y)}{\left[\sum(x)\right]^2-n\sum(x^2)} \qquad (4)$$

$$b=\frac{\sum(x).\sum(y)-n.\sum(x.y)}{\left[\sum(x)\right]^2-n.\sum(x^2)}$$

En segundo lugar consideremos el caso donde la relación entre **x** e **y** es de segundo grado:

$$y = a + bx + cx^2 \qquad (5)$$

En este caso se necesita que:

$$\sum_{i=1}^{n}(a+bx_i+cx_i^2-y_i)^2 \qquad (6)$$

sea mínima. (6)

Las derivadas parciales correspondientes (que deben anularse a la vez en el mínimo) son las siguientes:

$$\frac{\delta}{\delta a}\sum(a+bx+cx^2-y)^2=2\sum(a+bx+cx^2-y)$$

$$\frac{\delta}{\delta b}\sum(a+bx+cx^2-y)^2=2\sum x(a+bx+cx^2-y)$$

$$\frac{\delta}{\delta c}\sum(a+bx+cx^2-y)^2=2\sum x^2(a+bx+cx^2-y)$$

Por lo tanto las condiciones de mínimo son:

$$\sum(a+bx+cx^2-y)=0$$

$$\sum x(a+bx+cx^2-y)=0 \qquad (7)$$

$$\sum x^2(a+bx+cx^2-y)=0$$

A fin de poder afirmar que las igualdades (7) son las condiciones del mínimo, se necesita demostrar que las derivadas segundas de (6) son positivas; y en efecto:

$$\frac{\delta^2}{\delta a^2}\sum(a+bx+cx^2-y)^2 = 2\frac{\delta}{\delta a}\sum(a+bx+cx^2-y) = 2\sum(1) = 2n > 0$$

$$\frac{\delta^2}{\delta b^2}\sum(a+bx+cx^2-y)^2 = 2\frac{\delta}{\delta b}\sum x(a+bx+cx^2-y) = 2\sum(x^2) > 0 \qquad (8)$$

$$\frac{\delta^2}{\delta c^2}\sum(a+bx+cx^2-y)^2 = 2\frac{\delta}{\delta c}\sum x^2(a+bx+cx^2-y) = 2\sum(x^4) > 0$$

Las igualdades (8) prueban que las (7) expresan efectivamente las condiciones de mínimo.

Las igualdades (7) pueden escribirse así:

$$n\,a + \sum(x)\,b + \sum(x^2)\,c = \sum(y)$$

$$\sum(x)\,a + \sum(x^2).b + \sum(x^3)\,c = \sum(x\,y) \qquad (9)$$

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

Ejemplo — Sean **x** e **y** dos variables de las cuales se han obtenido experimentalmente los siguientes pares de valores:

CUADRO II

x	0	5	10	15
y	1.80	1.45	1.18	1.00

Construyamos el siguiente cuadro:

x	y	x^2	x^3	x^4	xy	x^2y
0	1,80	0	0	0	0,00	0,00
5	1,45	25	125	625	7,25	36,25
10	1,18	100	1000	10000	11,80	118,00
15	1,00	225	3375	50625	15,00	225,00
30 $=\sum(x)$	5,43 $=\sum(y)$	350 $=\sum(x^2)$	4500 $=\sum(x^3)$	61250 $=\sum(x^4)$	34,05 $=\sum(xy)$	379,25 $=\sum(x^2y)$

Cuadro III

Averigüemos primero **a** y **b** en la expresión:

$$y = a + bx$$

$$a = \frac{30 \times 34.05 - 350 \times 5.43}{30 \times 30 - 4 \times 350} = \frac{-879}{-500} = 1.758$$

$$b = \frac{30 \times 5.43 - 4 \times 34.05}{30 \times 30 - 4 \times 350} = \frac{26.7}{-500} = -0.0534$$

$$y = 1.758 - 0.0534\,x$$

En segundo lugar averigüemos **a**, **b** y **c** en la expresión

$$y = a + bx + cx^2$$

De acuerdo con las igualdades (9), se tiene:

$$\begin{array}{lrcrcrcr}
\text{I)} & 4a & + & 30b & + & 350c & = & 5.43 \\
\text{II)} & 30a & + & 350b & + & 4500c & = & 34.05 \\
\text{III)} & 350a & + & 4500b & + & 61250c & = & 379.25
\end{array}$$

Resolviendo este sistema se obtiene:

$$a = 1.7945$$
$$b = -0.0781$$
$$c = 0.0017$$

Por lo tanto:

$$y = 1.7945 - 0.0781x + 0.0017x^2$$

Comparemos:

x	y	$a+bx$	$a+bx+cx^2$	Δ_1	Δ_2	Δ_1^2	Δ_2^2
0	1,80	1,76	1,79	+ 0,04	+ 0,01	0,0016	0,0001
5	1,45	1,49	1,45	− 0,04	0,00	0,0016	0,0000
10	1,18	1,22	1,18	− 0,04	0,00	0,0016	0,0000
15	1,00	0,96	1,01	+ 0,04	− 0,01	0,0016	0,0001
					$\sum(\Delta^2)=$	0,0064	0,0002

Cuadro IV

$$\Delta_1 = y - (a + bx)$$

es decir: Δ_1 es la diferencia correspondiente entre el valor de **y** experimental y el calculado con la función lineal obtenida.

Análogamente: $\Delta_2 = y - (a + bx + cx^2)$

Otros ejemplos y más detalles pueden verse en:

KUSTER y THIEL — Tablas logarítmicas.

F. DANIELS — Preparación matemática para la Química Física.

J. W. MELLOR — Higher mathematics for students of Chemistry and Physics.

L. MICHAELIS — Curso de matemáticas para químicos y biólogos.