1. Caso no lineal: ajuste de una función potencial

La presión (P) y el volumen (V) en un tipo de gas están ligados por una ecuación del tipo

$$PV^{-b} = a\,,$$

siendo a y b dos parámetros desconocidos. A partir de sucesivas experiencias en el laboratorio, se han recogido los siguientes datos:

P (kg/cm3)	0.5	1	1.5	2	2.5	3
V (litros)	1.65	1.03	0.74	0.61	0.53	0.45

Objetivo: estimar los parámetros a y b realizando el ajuste de la función potencial $P = aV^b$.

Para comenzar nuestros cálculos, disponemos los datos observados de las magnitudes P y V en la hoja de cálculo, por ejemplo, en dos columnas, tal y como aparecen en la Figura 1, con un color de trama específico para recordar que son los datos experimentales.

El planteamiento para ajustar la función potencial $P = aV^b$ es el siguiente. Vamos a considerar su forma lineal equivalente obtenida al aplicar logaritmo neperiano en su expresión, es decir,

$$\ln(P) = \ln(aV^b) = \ln(a) + b\ln(V)\,.$$

Obtenemos así la ecuación lineal $y = A + bx$, donde las nuevas magnitudes vienen dadas por $y = \ln(P)$ y $x = \ln(V)$ y, además, el nuevo parámetro es $A = \ln(a)$. De esta forma, procederemos a ajustar el modelo lineal auxiliar anterior, obteniendo así estimaciones para los parámetros A y b. Así, la función potencial ajustada vendrá dada por los estimaciones de a y b, siendo $a = \exp(A)$. Finalmente, el grado de adecuación de un modelo $P = F(V)$ a los datos, la bondad de ajuste para dicho modelo, será cuantificado a través del error típico:

$$\epsilon(F) \;=\; \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(P_i - F(V_i)\right)^2}\,,$$

siendo $\hat{P}_i = F(V_i)$, para cada i.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	**Problema 4**									
2		P	presión y		P* V^(-b) = a		**Modelo potencial :**		**P = a V^b**	
3		V	volumen de un gas							
4									**Modelo potencial**	
5			**y**	**x**	**y^2**	**x^2**	**y*x**	**predi(y)**		**Error**
6	**P (kg/cm2)**	**V (litros)**	**ln(P)**	**ln(V)**	**ln(P)^2**	**ln(V)^2**	**ln(P)*ln(V)**	**predi(ln(P))**	**Predi(P)**	**P - Predi(P)**
7	0.5	1.65	-0.6931472	0.50077529	0.480453	0.2507759	-0.347111	-0.6806671	0.5062791	-0.0062791
8	1	1.03	0	0.0295588	0	0.0008737	0	-0.0289771	0.9714387	0.0285613
9	1.5	0.74	0.4054651	-0.3011051	0.164402	0.0906643	-0.1220876	0.4283295	1.5346916	-0.0346916
10	2	0.61	0.6931472	-0.4942963	0.480453	0.2443289	-0.3426201	0.695512	2.0047352	-0.0047352
11	2.5	0.53	0.9162907	-0.6348783	0.8395887	0.4030704	-0.5817331	0.8899361	2.4349741	0.0650259
12	3	0.45	1.0986123	-0.7985077	1.206949	0.6376145	-0.8772504	1.1162348	3.053336	-0.053336
13		Suma :	2.4203681	-1.6984533	3.1718456	1.6273277	-2.2708021			
14	n =	6								
15	media(y) =	0.4033947		Var[y] =	0.3659137					
16	media(x) =	-0.2830755		Var[x] =	0.1910895					
17				S[y] =	0.604908					
18				S[x] =	0.4371379					
19	S[x,y] =	-0.2642758								
20										
21	**Recta de m.c. de y| x, es decir, ln(P) = A + b*ln(V) :**									
22	**b =**	**-1.382995**		**r =**	**-0.9994239**					
23	**A =**	**0.0119026**		**r^2 =**	**0.9988481**					
24	**a =**	1.0119737								
25	**Error típico del modelo lineal ajustado asociado al modelo potencial =**						0.0205301			
26										
27	**Error típico del modelo potencial ajustado =**				0.0390602					

Figura 1: Cálculos en el ajuste de la función potencial $P = aV^b$.

Ajuste lineal (auxiliar): $y = A + b\,x$

En primer lugar, a partir de las observaciones de P y V suministradas, obtenemos los valores de las dos nuevas magnitudes $y = \ln(P)$ y $x = \ln(V)$. Una forma de organizar los cálculos consiste en crear dos nuevas columnas para x e y, haciendo uso de la función `ln` de nuestra hoja de cálculo, tal y como aparece en la Figura 1.

Realizaremos todos los cálculos asociados al ajuste lineal planteado $y = A + bx$ en la hoja de cálculo. Para ello, iremos añadiremos las columnas necesarias para ir almacenando los cálculos intermedios necesarios (`x^2`,`y^2` e `y*x`) para obtener la recta de m.c. de $y|x$, $y = A + bx$. De la Figura 1, se concluye que

$$y = 0.0119 - 1.383\,x\,.$$

El signo de la pendiente de la recta ajustada evidencia la correlación negativa entre x e y, confirmada además por el valor $r \approx -0.9994$ (ver Figura 2). Por su parte, el grado del ajuste lineal a los datos de x e y (no son los datos experimentales originales) es establecido por $r^2 \approx 0.99885$, interpretándose que el 99.885 % de la variabilidad de y es explicada por x a través del modelo lineal ajustado. En definitiva, el ajuste lineal realizado puede calificarse de difícilmente mejorable, tal y como lo podemos corroborar en la Figura 2.

Ajuste potencial: $P = aV^b$

A partir del ajuste lineal anterior, los parámetros de la función potencial son obtenidos sabiendo que $a = \exp(A)$. De esta forma, la función potencial ajustada en la Figura 1 viene dada por

$$P \;=\; 1.01197\,V^{-1.383} \tag{1}$$

Aunque en el caso de un modelo lineal disponemos de una gran versatilidad a la hora de medir la bondad de ajuste, el caso potencial es algo más limitado. En concreto, la forma de medir la bondad de ajuste del modelo potencial, que era nuestro objetivo, viene establecida por su error típico asociado.

Para obtener el error típico del modelo potencial, $\epsilon(\mathit{potencial})$, necesitamos obtener los valores estimados de la presión, en base a dicho modelo, para cada valor del volumen, es decir, los valores $\hat{P}_i = a\,V_i^b$, para cada i. Estos valores aparecen calculados en la columna `Predi(P)` de la Figura 1.

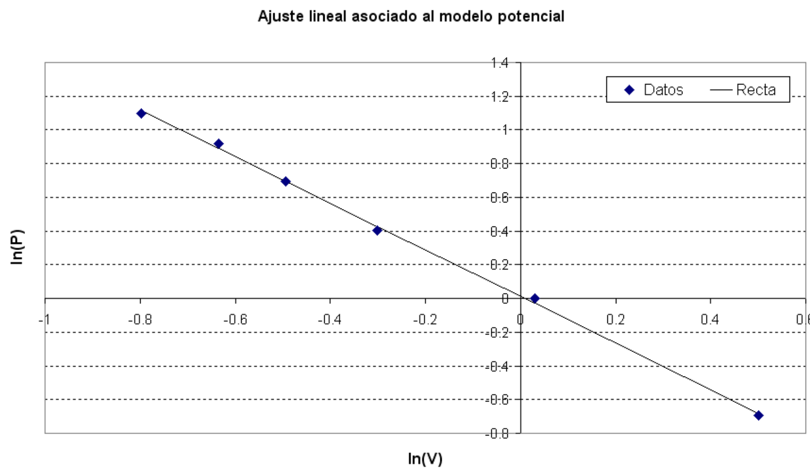

Figura 2: Representación gráfica de los datos de $y = \ln(P)$ y $x = \ln(V)$ junto con la recta de m.c. de $y = A + bx$. Los elementos aquí representados corresponden al ajuste lineal auxiliar en el ajuste de la función potencial.

Asimismo, a partir de sus errores asociados $P_i - \hat{P}_i$, que aparecen en la columna `P-Predi(P)`, el error típico es calculado, por ejemplo, con la fórmula `RAIZ(SUMA.CUADRADOS(J7:J12)/B14)` (ver Figura 1). Así, se obtiene que $\epsilon(potencial) \approx 0.039$. Esto nos indica un alto grado de ajuste entre los valores observados de la presión y sus aproximaciones con el modelo potencial, tal y como queda además confirmado en la Figura 3.

Para finalizar, y tan sólo como ilustración, se va a realizar el estudio de un modelo lineal para relacionar la presión y el volumen. Obviamente, la Figura 3 desaconsejaría la elección de un modelo lineal. Sin embargo, nuestro objetivo es tan sólo ilustrar cómo llevar a cabo la comparación entre distintos modelos.

Ajuste lineal: $P = c + dV$

Los cálculos del nuevo ajuste lineal podrían ser realizados en una nueva hoja de cálculo aparte, con objeto de no mezclar los cálculos con los del ajuste realizado anteriormente. A partir de la Figura 4, el ajuste lineal así obtenido establece que $P = 3.33776 - 1.9015V$, siendo $r^2 = 0.829$. Aunque la proximidad del modelo lineal a los datos es alta, la Figura 3 muestra cómo a veces la

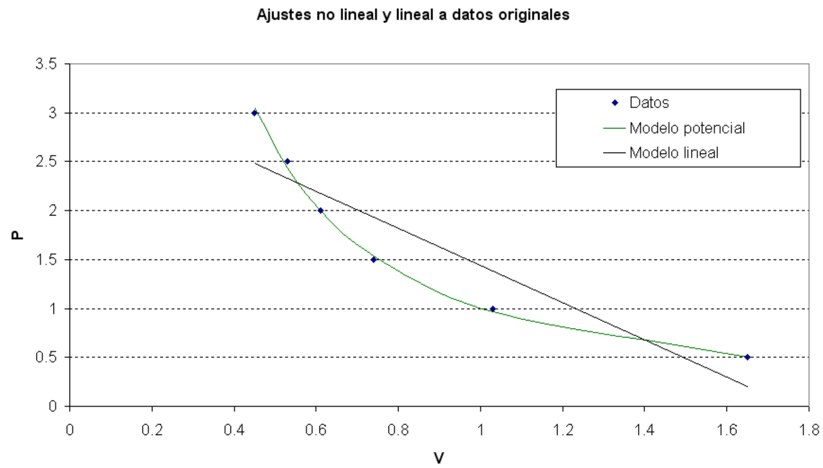

Figura 3: Datos observados de la presión (P) y el volumen (V) junto con los dos modelos ajustados.

proximidad no es suficiente. Observamos que existe una pauta en los datos que no es recogida por el modelo lineal.

En cualquier caso, a la hora de comparar el modelo lineal y el modelo potencial, utilizando el criterio del grado de ajuste, los errores típicos para ambos modelos nos proporcionan una herramienta básica a la hora de establecer un criterio objetivo. En nuestro caso, se tiene que $\epsilon(lineal) \approx 0.353$, es decir, un error 10 veces más grande que el error asociado al modelo potencial (ver Figura 1). Por tanto, el modelo potencial representa con mayor *precisión* la dependencia de la potencia respecto al volumen en el tipo de gas considerado.

P (kg/cm2)	V (litros)	P^2	V^2	P*V	Predi(P)	
0.5	1.65	0.25	2.7225	0.825	0.20026915	
1	1.03	1	1.0609	1.03	1.3792055	
1.5	0.74	2.25	0.5476	1.11	1.93064347	
2	0.61	4	0.3721	1.22	2.1778398	
2.5	0.53	6.25	0.2809	1.325	2.32996062	
3	0.45	9	0.2025	1.35	2.48208144	
10.5	5.01	22.75	5.1865	6.86		
Recta de m.c. de P|V			**P = c +d V**			
n =	6					
media(P) =	1.75		S2(P) =	0.72916667	S(P) =	0.85391256
media(V) =	0.835		S2(V) =	0.16719167	S(V) =	0.40889078
S(P,V) =	-0.31791667					
r(P,V) =	-0.91052648		r^2(P,V) =	0.82905847		
d =	-1.90151024					
c=	3.33776105					
Error típico del modelo lineal ajustado =				0.3530508		0.3530508

Figura 4: Cálculos en el ajuste de la función lineal $P = c + dV$.