Funciones no lineales de una sola variable interesantes en Farmacia

Francisco A. Ocaña Lara
Dpto. de Estadística e Investigación Operativa, UGR

Febrero de 2008

Descripción

En la parte dedicada al ajuste de funciones no lineales se consideran una serie de funciones clásicas (pág. 165, Valderrama (1995)), entre las que podemos señalar las siguientes:

Exponencial: $y \;=\; a\, e^{b\,x}\,, \qquad \forall\, x \in \mathbb{R}.$

Potencial: $y \;=\; a\, x^{b}\,, \qquad \forall\, x > 0.$

Hiperbólica: $y \;=\; a + \dfrac{b}{x}\,, \qquad \forall x \neq 0.$

Michaeliana: $y \;=\; \dfrac{a\,x}{b+x}\,, \qquad \forall x \neq -b.$

Cuando esta función[1] es utilizada para explicar la velocidad de reacciones químicas (enzimáticas, etc.), suele ocurrir que $x \geq 0$ y que los parámetros a y b toman valores positivos. Además, estos parámetros presentan significados muy interesantes desde un punto de vista cinético, pues, en tal caso, $y(x) \leq a$, $\text{lím}_{x\to\infty} y(x) = a$ e $y(b) = a/2$.

Logística: $y \;=\; \dfrac{1}{1+ae^{bx}}\,, \qquad \forall x \in \mathbb{R}$, donde $a > 0$ y $b < 0$.

En esta práctica mostraremos algunas potencialidades de una hoja de cálculo (Excel o Calc) en el análisis de funciones de una variable, considerando algunos de los anteriores tipos de funciones como ejemplos. Asimismo, recordaremos algunos conceptos de funciones de una sola variable: derivada y aproximación local.

[1] También denominada función de Michaelis–Menten.

En todo lo que sigue, y siempre que no se especifique lo contrario, consideraremos el tipo *exponencial* para fijar ideas.

1. Representación gráfica de funciones de una sola variable

A continuación vamos a construir la gráfica de uno de estos tipos de funciones (el tipo exponencial).

1. Construimos una columna que contenga los valores de x donde evaluaremos, más adelante, la función. En concreto, calculamos los valores (nodos) de abcisas dados por

$$x_i = -5 + i * 0.2\,, \qquad \forall\, i = 0, 1, \ldots, 50\,.$$

   Obsérvese que $\Delta x = 0.2$. De esta forma, obtendremos una secuencia de valores en el intervalo $[-5, 5]$, que será el intervalo en el que centraremos el estudio de la función.

2. Podríamos construir una tabla para almacenar los posibles valores de los parámetros a y b de este tipo de funciones, situándola en la primeras filas de la hoja de cálculo. Así, podremos variar dichos parámetros con objeto de comparar sus correspondientes gráficas.

a	2	2	2
b	1	-1	1.2

3. Calculamos los valores $y(x_i)$ en una columna adyacente, procurando que cada valor de x_i se encuentre al lado de su imagen, $y(x_i)$. Como se obtendrán varias columnas de esta forma, implementaremos los cálculos en función de los parámetros a y b. Por seguir un cierto orden, sería interesante que los valores de $y(x_i)$ apareciesen situados en una columna, justo debajo de los valores de sus correspondientes parámetros. Esto no es obligado en la hoja de cálculo, tan sólo es aconsejable para no perdernos.

4. Podemos obtener representaciones de datos de la forma $\{(x_i, y_i)\}_i$ en el menú `Gráfico`, el tipo de gráfico `XY Dispersión` y la opción `Dispersión de puntos conectados por líneas suavizadas...`. Cuando realice la representación de cada función, no olvide indicar un nombre distinto para que aparezca como `label` en la hoja que contiene los

datos. Asimismo, se recomienda que cada gráfica aparezca como una hoja aparte.

5. Puede repetir los últimos dos puntos una vez más. De esta forma, podrá comparar dos funciones exponenciales asignando valores a sus correspondientes parámetros a y b, por ejemplo los indicados en la tabla anterior.

Cuestiones:

1. En base a las representaciones gráficas, ¿cuál es el efecto de los parámetros a y b de la función exponencial? ¿Podría indicar el significado de dichos parámetros?

2. Repita los pasos anteriores con el resto de las funciones, modificando convenientemente la partición de nodos a considerar según el dominio de la función.

2. Aproximación de la derivada

A continuación, vamos a obtener una aproximación de la derivada de una función exponencial, muy habitual cuando se trabaja con datos experimentales, sobre el intervalo considerado. Además, realizaremos un estudio comparativo de dicha aproximación con la función derivada (teórica) obtenida aplicando las reglas habituales de derivación.

Continuando con el tipo exponencial, es sabido que

$$y'(x) \;=\; a\,b\,e^{bx} \;=\; b\,y(x)\,.$$

Consideremos una cierta función exponencial ($a = 2$ y $b = 1$, por ejemplo) y obtengamos una columna con los valores $y'(x_i)$. Estos valores corresponderían a los valores *exactos* de la función derivada y'.

Por otra parte, haciendo uso del concepto de derivada, podemos aproximar dichas derivadas de la forma siguiente:

$$y'_i = y'(x_i) \;=\; \lim_{\Delta_x \to 0} \frac{y(x_i + \Delta_x) - y(x_i)}{\Delta_x} \;\approx\; z_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}\,,$$

donde estamos considerando $\Delta x = x_{i+1} - x_i$, que es independiente de i. Podría haberse también considerado $-\Delta x$.

Vamos a realizar a continuación un estudio comparativo de los valores (reales) $y'_i = y'(x_i)$, que han sido obtenidos analíticamente, y sus aproximaciones discretas, z_i, obtenidas sólo a partir de los valores $\{(x_j, y_j)\}$.

1. Obtenga una representación gráfica en la que aparezcan tanto la derivada como su aproximación. Compare en dicho gráfico los valores de y_i' y z_i.

2. Para estudiar su error, obtenga una columna adicional con los errores dados por
$$e_i = y_i' - z_i \,.$$

3. Represente en una gráfica distinta los valores (errores) $\{e_i\}$.

4. Analice los errores desde un punto de vista descriptivo. Calcule la media, mediana, cuantiles... de los errores e_i.

3. Polinomios de Taylor

Analizaremos a continuación algunas ideas acerca de la aproximación local a una función proporcionada por el Teorema de Taylor. En concreto, vamos a obtener algunos polinomios de Taylor de la función exponencial considerada ($a = 2$ y $b = 1$) en el apartado anterior en $x_o = 4$. En concreto, los polinomios de Taylor de grados uno (recta tangente), dos y tres vendrían dados por

$$\begin{aligned}
p_1(x) &= y(4) + y'(4)(x-4), \\
p_2(x) &= y(4) + y'(4)(x-4) + \frac{y^{(2)}(4)}{2}(x-4)^2 \\
&= p_1(x) \;+\; 0.5\, y^{(2)}(4)\,(x-4)^2\,, \\
p_3(x) &= p_2(x) \;+\; \frac{y^{(3)}(4)}{6}\,(x-4)^3\,, \qquad \forall\, x \in \mathbb{R}\,,
\end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned}
y^{(2)}(x) &= ab^2 e^{bx} = by'(x), \\
y^{(3)}(x) &= ab^3 e^{bx} = by^{(2)}(x)
\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta lo anterior, vamos a seguir los siguientes pasos.

- En una misma hoja, obtener los valores de la función exponencial, $y(x_i)$, y, en sendas columnas adyacentes, los valores de los polinomios de Taylor en el punto 4 construidos, $p_1(x_i)$, $p_2(x_i)$ y $p_3(x_i)$.

- En una misma gráfica, representar los valores $y(x_i)$ y, en columnas adyacentes, sus correspondientes aproximaciones dadas por los polinomios de Taylor anteriores. Para facilitar la visión de las gráficas anteriores, se recomienda construirlas con los valores de ordenadas asociados a los valores de x en el intervalo $[1,5]$.

  De esta forma, el lector puede visualizar el nivel de ajuste de los distintos polinomios de Taylor a la función exponencial considerada.

  Cuestiones:

  1. ¿Dónde aproximan los polinomios de Taylor obtenidos a la función exponencial?
  2. Compare el nivel de ajuste con el grado del polinomio de Taylor. Discuta el resultado teórico que establece la fórmula del resto de los polinomios de Taylor.

Referencias

[1] Valderrama Bonnet, Mariano J. (1995). *Modelos Matemáticos en las Ciencias Experimentales*. Ediciones Pirámide, Madrid.