



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**EVALUACION DE LA TECNICA DEL
GRADIENTE Y DE SUS VARIANTES
PARA EL AJUSTE DE DATOS
EXPERIMENTALES**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
LICENCIADO EN FISICA**

PRESENTA:

ESPERANZA GEORGINA VALDES MEDINA

MEXICO, D. F.

1985



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INTRODUCCION

El objetivo primordial del análisis numérico es el de obtener una solución de los problemas mediante el uso de computadoras. En este análisis no se pretende obtener la solución exacta del problema, sino obtener una solución aproximada, la cual difiera de la exacta dentro de una tolerancia predeterminada.¹

La mayor dificultad que se tiene en cumplir dicho objetivo surge al tratar de determinar la mejor forma de solución, ya que para esto se requiere, en general, de la solución misma del problema. En el caso menos drástico, se deben conocer las propiedades de las funciones involucradas en el análisis. Debido a tales dificultades, debe prestarse mayor atención al desarrollo del algoritmo, más que al formulismo matemático que de origen a este primero.

El estudio de los algoritmos se realiza mediante dos técnicas, las cuales pueden aplicarse individual o simultáneamente:²

La primera de estas técnicas evalúa al algoritmo a partir de la comparación directa del resultado del cómputo con el valor exacto del problema. A esta técnica se le conoce con el nombre genérico de análisis directo de errores.

La segunda técnica aplicable a la evaluación del algoritmo considera al resultado del cómputo como el valor exacto, solo que para un problema cuyos datos están ligeramente perturbados. En este caso, los errores del cómputo se adjudican a los datos originales del problema. Razón por la cual se conoce a esta técnica como análisis

regresivo de errores.

El análisis directo de los errores es el camino más lógico a seguir para examinar los efectos de la aritmética del cómputo en un proceso determinado, sin embargo, en ciertas ocasiones dicho análisis no puede distinguir la imprecisión del algoritmo con la inestabilidad del problema. El análisis regresivo de errores, generalmente, no nos lleva a una estimación directa de la precisión de los resultados; sin embargo, es muy sencilla y puede ser de gran utilidad para determinar la estabilidad del algoritmo.

El objetivo del presente trabajo es el de evaluar la confiabilidad y estabilidad de la técnica del gradiente, para problemas de ajuste de coeficientes a partir de datos experimentales. Para esto se aplicó esta técnica a un problema relativamente sencillo, de cuya estabilidad no hubiese dudas, además de que se tuviera el valor exacto de la solución, con el fin de poder aplicar la técnica directa de análisis de errores. Esto permitió encontrar con mayor facilidad las causas de los errores y así poderlas corregir. De aquí que las inestabilidades detectadas en los resultados pudieron ser adjudicadas directamente a inestabilidades en la técnica. Por otro lado, por el tipo de problema que se eligió, fue posible reducir a un mínimo la aritmética de cómputo, minimizándose así las inestabilidades en el algoritmo, debidas a los errores de redondeo o de truncado en los resultados parciales.

Finalmente, el problema a estudiar se seleccionó de tal forma que pudiera ser resuelto por otro algoritmo fundamentalmente diferente y cuya aplicabilidad estuviera plenamente probada, obteniéndose así un punto más de comparación de los resultados

obtenidos.

El presente trabajo ha sido dividido para su presentación en tres capítulos.

En el primer capítulo se comparan dos de las técnicas más usuales para el ajuste de coeficientes a partir de datos experimentales, basadas éstas en el método de mínimos cuadrados. En la primera se usa una solución directa del sistema de ecuaciones por el método de Gauss-Jordan y en la segunda se utiliza la técnica del gradiente. Así mismo se analiza el tipo de problemas para los cuales son aplicables estas técnicas.

En el segundo capítulo se analiza detalladamente la técnica del gradiente para datos generados con el error de redondeo característico de la computadora en uso, con el fin de detectar la sensibilidad del método a diferentes parámetros. Así mismo se van proponiendo modificaciones a la técnica en función del análisis de los resultados anteriores con el fin de minimizar la desviación media estandar alcanzable.

Finalmente, en el tercer capítulo, se dan las conclusiones mostrándose la necesidad de hacer uso de las modificaciones propuestas, con el fin de obtener un método confiable para el ajuste de los coeficientes a partir de datos experimentales, fundamentalmente en los casos en que el método de mínimos cuadrados, en su forma directa, no sea aplicable.

CAPITULO I

La importancia del análisis numérico como parte del Método Científico radica en que una hipótesis del fenómeno físico en estudio, se justifica o descarta en función de los resultados obtenidos a través de dicho análisis. Esto es, mediante el análisis numérico se analizan y correlacionan los datos experimentales y la hipótesis propuesta.

Las técnicas utilizadas en los métodos numéricos, desde el punto de vista de la matemática involucrada, se pueden dividir en directas e iterativas. Las directas son aquellas que nos llevan a una respuesta en un número determinado de pasos (operaciones aritméticas y booleanas) y están sujetas solamente a errores de redondeo, como por ejemplo, la evaluación de una ecuación algebraica. En las técnicas iterativas el número de pasos a realizar no está definido y depende del problema, así como de los datos iniciales. Además de los errores de redondeo de la aritmética de cómputo surgen los errores de truncado del proceso. Para este tipo de técnica es característica la introducción de un parámetro de truncado generalmente expresado como el máximo error aceptable, de tal forma que cuando una variable determinada alcanza dicho valor, se suspende el proceso iterativo.³

I.1 Método de Mínimos Cuadrados

Considerese un conjunto de observaciones las cuales han sido graficadas con la esperanza de obtener una línea recta en la gráfica, como se muestra en la figura I.1. Los puntos muestran esencialmente

una dispersión por lo que es posible, además de una línea recta, trazar muchas otras curvas. El problema es, cuál de estas líneas elegir como la mejor representación del fenómeno físico?. Desde el punto de vista matemático la respuesta es sencilla, la curva cuyos parámetros muestran la menor variación en repetidos muestreos. Para esto es necesario tener un criterio para el cálculo de los valores estimados de los parámetros de las curvas. Sin embargo nadie puede afirmar que no exista una curva, aun desconocida, que dé un mejor ajuste. Es por esto que la justificación matemática para aceptar cualquier postulado que describa al fenómeno físico, carece de sentido. De aquí que, el mejor camino a seguir es el de interpretar los resultados en base a una teoría del fenómeno físico, la cual ha sido formulada a partir de una serie de postulados.⁴ Ya que el experimentador debe interpretar sus observaciones en términos de una función en particular, se debe determinar el criterio que permita la mejor evaluación de los parámetros de dicha función. Este criterio viene a ser el Método de Mínimos Cuadrados, el cual puede enunciarse como sigue:⁵

'El valor mas probable de una observable es aquel en que la suma de los cuadrados de las desviaciones entre las observables y dicho valor, sea un mínimo'.

Supongamos que un experimento ha arrojado un conjunto de 'm' valores de 'y' como función de 'x'. Por simplicidad podemos considerar los valores de 'x' como exactos y los valores de 'y' sujetos a una incertidumbre, la finalidad es determinar las constantes de la recta $y=ax+b$ que mejor se ajusten a las observaciones. Asumiendo que la incertidumbre en el valor de 'y' está

regida por una distribución normal, la probabilidad de observar un valor $y(i)$ localizado en un pequeño intervalo Δy es:

$$P_r(y_i) \equiv \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-(y_i - a - bx_i)^2 / 2\sigma^2} \quad \Delta y \equiv k e^{-(y_i - a - bx_i)^2 / 2\sigma^2}$$

donde 'k' es una constante. Expresiones similares son válidas para $P_r(y(2)), \dots, P_r(y(m))$ donde 'm' es el número de puntos u observaciones. La probabilidad 'P' de que ocurran simultáneamente todos estos valores de 'y' es:

$$P = P_r(y_1) P_r(y_2) \dots P_r(y_m) = \\ = k^m e^{-\sum_{i=1}^m (y_i - a - bx_i)^2 / 2\sigma^2}$$

La regresión lineal se considera la mejor representación de los datos siempre y cuando 'P' tenga un valor máximo, lo que ocurre cuando 'a' y 'b' sean tales que minimicen la suma involucrada en el exponente:

$$S = \sum_{i=1}^m (y_i - a - bx_i)^2$$

De aquí en adelante los sub-índices (i) serán omitidos ya que se entiende que las sumatorias serán sobre todas las 'm' observaciones. La condición para que 'S' sea mínima es:

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum (y - a - bx) = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum x (y - a - bx) = 0$$

Reordenando estas expresiones se obtiene el sistema de ecuaciones simultáneas conocidas también como ecuaciones normales,

$$ma + b \sum x = \sum y \\ a \sum x + b \sum x^2 = \sum xy$$

de donde:

$$a = (\sum y - b \sum x) / m = \bar{y} - b \bar{x}$$

$$b = \frac{m \sum xy - \sum x \sum y}{m \sum x^2 - (\sum x)^2} = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2}$$

Estos valores determinan la mejor recta que pueda pasar por la gráfica de los datos experimentales. Por su significado estadístico, es posible asignar una desviación estándar a los valores estimados de 'a' y 'b', la cual estará expresada en términos de la cantidad 'S', que es la desviación estándar de la regresión lineal, esto es:

$$S^2 = \frac{\sum (y_i - (ax_i + b))^2}{m - 2}$$

y 'Sa' y 'Sb' vienen dados por:

$$S_a^2 = S^2 / n \sum x^2 - (\sum x)^2$$

$$S_b^2 = S^2 \sum x^2 / n \sum x^2 - (\sum x)^2$$

Nótese que el denominador tiene el valor de m-2, que es el grado de libertad del sistema, ya que 'a' y 'b' han sido determinadas a partir de los datos experimentales; se dice entonces que 'S²' es de base (m-2).

En general, la aplicación del método de mínimos cuadrados a un polinomio de grado 'N' nos lleva a un sistema de 'N+1' ecuaciones.

Sistemas de ecuaciones lineales similares a los obtenidos por el método de mínimos cuadrados se obtienen en el análisis de toda una variedad de problemas en física y en ingeniería, fundamentalmente en aquellos en que la hipótesis depende de varios parámetros o variables.

En el análisis numérico existe toda una gama de técnicas

especializadas para la solución de los sistemas de ecuaciones simultáneas de la forma⁷

$$\begin{aligned} f_1(x_1, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

Para el caso general en que las funciones f_1, f_2, \dots, f_n no puedan ser simplificadas, las técnicas más utilizadas son la de Jacobi y la de Gauss-Seidel, que son técnicas iterativas. Sin embargo, si las funciones son lineales en las 'x', el sistema puede ser escrito en la forma:

$$\begin{aligned} E_1 &: a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \dots + a_{1n} x_n = b_1 \\ E_2 &: a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + \dots + a_{2n} x_n = b_2 \\ &\vdots \\ E_n &: a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + \dots + a_{nn} x_n = b_n \end{aligned}$$

o más concisamente como $A \times B$, en donde A es la matriz de coeficientes, B es un vector y x es el vector solución. Las técnicas aplicables en este caso son: inversión de matrices, sustitución directa, cofactores, eliminación de Gauss o de Gauss-Jordan; todas ellas catalogadas entre las técnicas directas. Estas técnicas son aplicables solamente que el número de ecuaciones no sea mayor que 40. Las técnicas iterativas también se utilizan en el caso de sistemas lineales, cuando el número de ecuaciones es mayor de 100.⁷

De las técnicas antes mencionadas, las de eliminación de Gauss y de Gauss-Jordan son las más adecuadas cuando se utilizan micro-computadoras, debido al uso racional de la memoria de la máquina y por basarse estas en las transformaciones elementales de

las matrices. Tales transformaciones se realizan al multiplicar una de las tres matrices elementales, por la derecha o por la izquierda, de la matriz de coeficientes.

1. La matriz elemental de primer tipo 'Q' es una matriz diagonal formada al reemplazar el i-ésimo elemento diagonal de la matriz identidad por el valor 'q', por ejemplo, si $i=3$

$$Q = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

2. La matriz elemental de segundo tipo 'R' se forma al intercambiar dos cualesquiera renglones, en la matriz identidad 'I', por ejemplo, para $i=1$ y $j=3$

$$R = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

3. La matriz elemental de tercer tipo 'S' se forma al sustituir en la matriz identidad el valor de la constante 's' por uno de los elementos no diagonales, por ejemplo, para $i=3$ y $j=1$

$$S = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ s & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

La multiplicación por la derecha de una matriz arbitraria 'A' por cualquiera de estas matrices elementales produce la llamada operación elemental de renglón:

QA es el producto de los elementos de un renglón por un escalar;

RA es el intercambio de dos renglones y

SA es la suma de todos los elementos de un renglón con los elementos de otro multiplicados por un escalar.

Analogamente, la multiplicación por la derecha de una matriz arbitraria 'A' por alguna de las matrices elementales produce una operación elemental de columna.

I.2 Eliminación de Gauss

Los métodos directos de solución de sistemas de ecuaciones se basan en múltiples manipulaciones de las matrices elementales.

Considerese el sistema general ecuaciones lineales,

$$C = B | u = \begin{array}{ccc|c} b_{11} & b_{12} & b_{13} & u_1 \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & u_2 \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & u_3 \end{array}$$

para poder triangularizar este sistema, se requieren tres matrices elementales del tercer tipo S_1, S_2, S_3 , tales que al multiplicarlas por la derecha con la matriz 'C' se obtiene:

$$S_3 S_2 S_1 C = \begin{array}{ccc|c} b_{11} & b_{12} & b_{13} & u_1 \\ 0 & b'_{22} & b'_{23} & u'_2 \\ 0 & 0 & b''_{33} & u''_3 \end{array}$$

La sustitución hacia atrás para resolver el sistema se puede expresar como el producto por la izquierda de tres matrices del primer tipo Q_1, Q_2, Q_3 y otras tres del tercer tipo S_4, S_5, S_6 , es decir:

$$Q_3 S_6 S_5 Q_2 S_4 Q_1 S_3 S_2 S_1 C = \begin{array}{ccc|c} I & 0 & 0 & x_1 \\ 0 & I & 0 & x_2 \\ 0 & 0 & I & x_3 \end{array}$$

Denotemos por 'E' el producto de estas nueve matrices elementales, entonces

$$EC = EB \mid U = I \mid x$$

y

$$EB = I$$

por lo tanto

$$E = B^{-1}$$

por ende, como un subproducto de la solución del sistema de ecuaciones por la técnica de eliminación, se obtiene el inverso de la matriz 'B'.

1.3 Eliminación de Gauss-Jordan

La técnica de eliminación de Gauss-Jordan es solamente una variante de la técnica de Gauss, en la que el efecto de sustitución hacia atrás y la triangularización se realizan en forma conjunta. En este caso solo se requiere de seis matrices elementales del tercer tipo:

$$S_6 S_5 S_4 S_3 S_2 S_1 C = I \mid x$$

Esto hace que la técnica de Gauss-Jordan, en el caso de micro-computadoras, sea la más adecuada de las técnicas para la solución de sistemas de ecuaciones lineales. En los marcos del presente trabajo, tales sistemas se obtienen al aplicar el método de mínimos cuadrados para el ajuste de coeficientes de una ecuación.

En aquellas situaciones en las que las técnicas directas para la solución de los sistemas de ecuaciones no son aplicables, lo que

resulta generalmente por la complejidad de las ecuaciones con que se represente la hipótesis, deberán ser utilizadas las técnicas iterativas. En estas técnicas el valor aproximado de la solución que se suministra inicialmente se va mejorando en función de las variaciones que sufre la desviación media cuadrática debidas al cambio del valor de los coeficientes en cada iteración. Dentro de las técnicas mas usuales de este tipo se encuentran: la de malla, la de cauce y la del gradiente.

I.4 Técnica de malla

Si la variación de χ^2 con cada parámetro $c(j)$ es independiente de que tan bien estén ajustados los otros parámetros, entonces los valores óptimos pueden ser determinados simplemente minimizando para cada parámetro por separado. Por medio de iteraciones sucesivas se puede localizar el mínimo local para cada parámetro en turno, y el mínimo absoluto puede ser así localizado con cualquier precisión deseada.

La principal desventaja de esta técnica es que si las variaciones de χ^2 no son independientes de los parámetros a ajustar, entonces puede converger muy lentamente.

Consideremos por ejemplo la suma del contorno de χ^2 para dos parámetros. La variación de χ^2 es, en general, aproximadamente elíptica cerca de un mínimo y típicamente la elipse está elongada como en la figura I.2. Si se inicia la iteración cerca de un vértice de la elipse, esta técnica es muy ineficiente, como lo podemos ver en el zigzaguo a través de la elipse. Sin embargo, la simplicidad de los cálculos compensa generalmente esta ineficiencia.

El procedimiento para la técnica de malla es el siguiente:⁸

- 1) un parámetro $c(j)$ se incrementa $\Delta c(j)$, escogiendo este incremento tanto en magnitud como en signo de tal manera que χ^2 decrezca,
- 2) el parámetro $c(j)$ es incrementado repetidamente por la misma cantidad hasta que χ^2 comience a crecer,
- 3) asumiendo que el comportamiento de χ^2 cerca de un mínimo pueda describirse en términos de una función parabólica del parámetro $c(j)$, se usan los últimos tres valores de χ^2 para determinar el mínimo de la parábola

$$C_j(3) = C_j(2) + \Delta C_j = C_j(1) + 2 \Delta C_j$$

$$\chi^2(3) > \chi^2(2) \leq \chi^2(1)$$

- 4) el mínimo de la parábola está dado por

$$C_j(\min) = a_j(3) - \Delta a_j \frac{\chi^2(3) - \chi^2(2)}{\chi^2(3) - 2\chi^2(2) + \chi^2(1)} + \frac{1}{2}$$

- 5) χ^2 es minimizada para cada parámetro en turno,
- 6) el procedimiento anterior se repite hasta que la última iteración conduzca a un decremento en χ^2 imperceptible o hasta que el valor sea comparable al error experimental.

I.5 Técnica del gradiente

La búsqueda del mínimo de la hipersuperficie de χ^2 puede ser mejorada si la dirección del zigzag en la técnica de malla se reemplaza con un vector más directo hacia el mínimo apropiado.⁹ En la técnica del gradiente para mínimos cuadrados todos los parámetros $c(j)$ se incrementan simultáneamente con magnitudes ajustadas de tal manera que la dirección resultante sea por el gradiente de χ^2 (o sea la dirección de máxima variación).

El gradiente $\nabla \chi^2$ o dirección en la cual χ^2 aumenta más rápidamente, es un vector cuyos componentes son iguales a la razón

del cambio de χ^2 en una dirección dada

$$\nabla \chi^2 = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial c_j} \hat{c}_j \right)$$

Para determinar el gradiente de χ^2 alrededor del punto de partida se muestrea independientemente cada parámetro de tal manera que se obtenga un valor aproximado de la primera derivada

$$(\nabla \chi^2)_j = \frac{\partial \chi^2}{\partial c_j} \approx \frac{\chi^2(c_j + f \Delta c_j) - \chi^2(c_j)}{f \Delta c_j}$$

La cantidad por la cual $c(j)$ es modificada, debe ser menor que el tamaño del paso $\Delta c(j)$, (f debe ser del orden de .1).

Esta definición del gradiente determina la magnitud, dejando las dimensiones de los coeficientes inalteradas. De hecho, si las dimensiones de $c(j)$ no son iguales las componentes del gradiente tampoco tendrán las mismas dimensiones. Definamos los parámetros $a(j)$ adimensionales normalizando cada parámetro $c(j)$ por un tamaño constante $\Delta c(j)$, que caracteriza la variación de χ^2 con respecto a $c(j)$:

$$a_j = \frac{c_j}{\Delta c_j}$$

Es decir podemos usar los valores de $\Delta c(j)$, que fueron escogidos anteriormente, para mejorar la búsqueda por la técnica de malla.

Definamos entonces un gradiente adimensional con magnitud unitaria, como

$$y_i = \frac{\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j}}{\sqrt{\sum_{k=1}^n \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} \right)^2}} \qquad \frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = \frac{\partial \chi^2}{\partial c_j} \Delta c_j$$

La dirección que se sigue en la técnica del gradiente es la dirección de la máxima disminución de χ^2 que es la dirección opuesta al gradiente γ .

La búsqueda empieza incrementando todos los parámetros simultáneamente por una cantidad $\delta c(j)$ cuyo valor relativo está dado por la componente correspondiente del gradiente adimensional γ , y cuya magnitud absoluta está dada por $\Delta c(j)$

$$\delta c_j = -\gamma_j \Delta c_j$$

donde el signo negativo asegura que el valor de χ^2 decrezca.

Entre las alternativas para continuar la búsqueda del mínimo de χ^2 , la más directa es la de volver a incrementar los parámetros por la misma cantidad. Una desventaja en esta alternativa es la dificultad de acercarse a la base del mínimo asintóticamente, más aún, saber siquiera que la solución es la mejor posible. Otra alternativa es la de calcular el gradiente en cada iteración, lo que resulta en una búsqueda ineficiente. El uso de pasos mayores hace la localización del mínimo menos precisa.

Una alternativa razonable, es la de buscar a lo largo de la dirección del gradiente original, en pequeños pasos, hasta que aumente. En este punto el gradiente se vuelve a calcular, iniciándose así un nuevo ciclo. Cuando la búsqueda rebasa a un mínimo, se recurre como en el caso anterior a una interpolación parabólica de χ^2 , mejorando así el valor de las constantes $c(j)$.

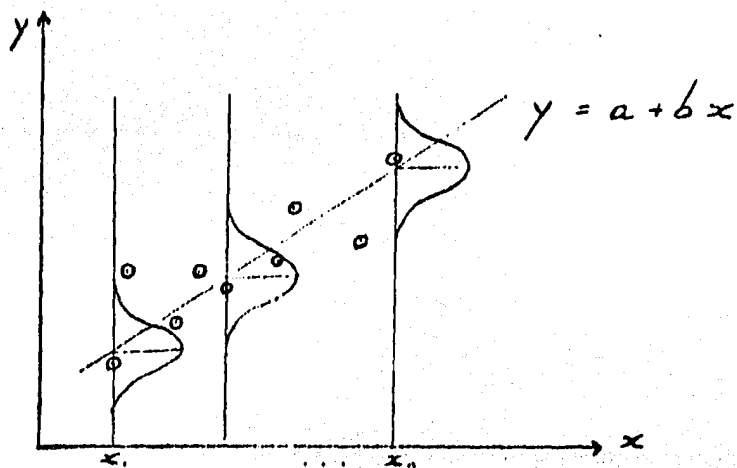


Fig. I.1

Representación gráfica de los puntos experimentales, en el modelo de regresión lineal, mostrándose la distribución de 'y' alrededor de la línea de la regresión.

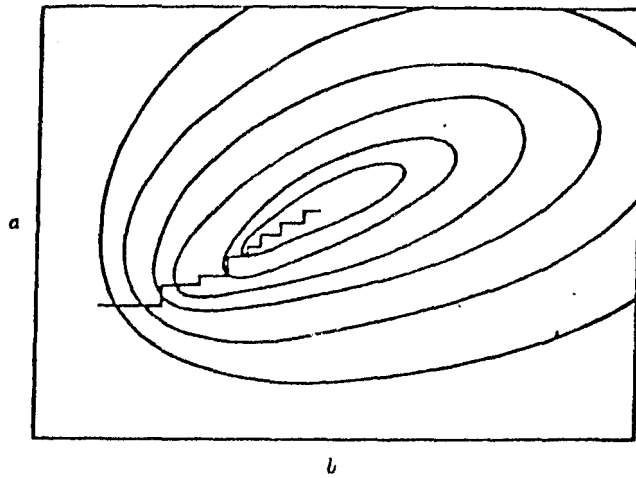


Fig. I.2

Trayectoria seguida en la técnica de malla, para un sistema de dos dimensiones, mostrando el perfil elíptico para iguales valores de χ^2 en la vecindad de un mínimo.

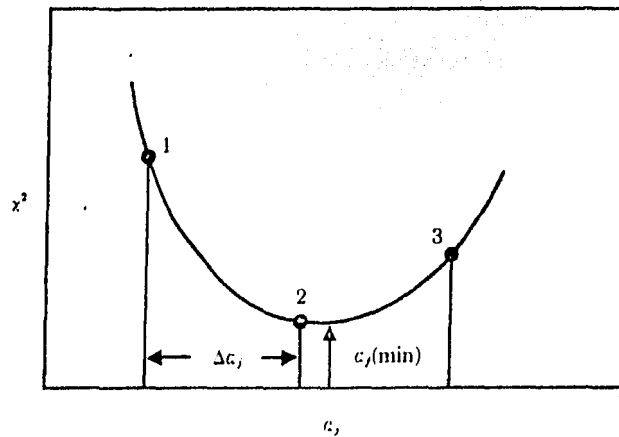


Fig. I.3

Interpolación parabólica para determinar el valor mínimo de χ^2 a partir de los tres últimos valores determinados para $C_j(1)$, $C_j(2)$ y $C_j(3)$.

CAPITULO II

En la literatura se cita a la técnica del gradiente como una de las técnicas para el ajuste de los coeficientes de una función arbitraria y generalmente se aplica en aquellos casos en que las ecuaciones normales obtenidas por el método de mínimos cuadrados no pueden resolverse directamente. Sin embargo en la literatura no se hace mención del grado de precisión que se puede obtener en el ajuste de los coeficientes por esta técnica. Con el fin de evaluar dicho grado de precisión se planteó un problema teórico que pudiera ser resuelto en ambas formas. Para esto se escogieron funciones polinomiales del tipo

$$y = \sum_{j=0}^m a_j x^j$$

donde 'm' es el grado del polinomio. Los datos $x(i)$ y $y(i)$ fueron generados directamente por la computadora. Los errores de redondeo propios de la misma, en este caso Commodore VIC 20, se determinaron al evaluar los coeficientes del polinomio por el método de mínimos cuadrados y la técnica de eliminación de Gauss-Jordan para la solución de las ecuaciones normales. Con los coeficientes así obtenidos se calculó el valor de χ^2 a partir de

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2 \quad \text{II.1}$$

En la figura II.1.a) se muestran los valores de χ^2 calculados para $N=10,30,50,70$ y 90 datos

$$x_i = -100 + \frac{200}{N} i$$

$$y_i = \sum_{j=0}^m a_j x_i^j$$

donde i va de 1 a 'N' y el dominio de 'x' es el intervalo de

$[-100, 100]$

Esto nos permite evaluar el mínimo orden de magnitud alcanzable para χ^2 con el equipo utilizado.

$$\frac{\chi^2}{N} \sim 10^{-14}$$

Las pruebas para la evaluación de la técnica del gradiente se hicieron en una primera etapa en función del número de datos generados, y de la precisión en los coeficientes a partir de los cuales se iniciaba el proceso iterativo.

En la figura II.1.b) se muestran los valores de χ^2 obtenidos para coeficientes iniciales que coincidieran con los de la ecuación en el orden de magnitud, mas no en sus cifras significativas.

La discrepancia entre los valores de χ^2 obtenida por estos dos enfoques es tan grande que se decidió modificar a la técnica del gradiente. Ya que esto implicaba la aplicación de la técnica a una gran variedad de ejemplos y condiciones iniciales, en base a las propiedades de las funciones polinomiales, la subrutina para la evaluación de χ^2 se modificó. Sustituyendo en la definición de χ^2 (II.1) la expresión para $y(i)$:

$$\bar{y}_i = C_0 + C_1 x_i + C_2 x_i^2$$

se tiene

$$\begin{aligned} \chi^2 &= \sum [(a_i - c_i) + (a_i - c_i)x + (a_i - c_i)x^2]^2 \\ &= \sum [Q_i^2 + 2Q_i Q_i x + (Q_i^2 + 2Q_i Q_i)x^2 + 2Q_i Q_i x^3 + Q_i^2 x^4] \end{aligned}$$

donde se definieron

$$Q(i) = a(i) - c(i)$$

finalmente

$$\chi^2 = S_0 Q_0^2 + 2Q_0 Q_1 S_1 + (Q_1^2 + 2Q_0 Q_2) S_2 + 2Q_1 Q_2 S_3 + Q_2^2 S_4 \quad II.3$$

donde

$$S_i = \sum_j x_j^i \text{ etc}$$

es constante durante todo el proceso y por lo tanto pueden ser calculados una sola vez. Los valores de la $Q(i)$ se pueden calcular ya que se conocen los valores exactos $a(i)$ del polinomio.

En la figura II.2 se muestra que la variación de χ^2 es muy pequeña en comparación con la discrepancia del valor obtenido por la solución directa del método de mínimos cuadrados, al variar la primera cifra significativa de los coeficientes iniciales en un factor 2,4 y 8. De aquí que se decidiera variar la cifra significativa en la que coincidieran los coeficientes del polinomio y los iniciales, obteniéndose de esta manera una mayor sensibilidad de la técnica a dichas variaciones.

Como puede observarse en la figura II.3 la dependencia es tal que por cada cifra significativa que se diera en el coeficiente inicial la variación en χ^2 es de aproximadamente dos ordenes de magnitud, esto implica que si se deseara un valor de χ^2 compatible con errores experimentales clásicos (5 - 10%), se requerirían unos valores en los coeficientes iniciales con más de cuatro cifras significativas exactas.

Como primer resultado se obtuvo que la técnica del gradiente, tal y como viene reportada en la literatura, puede ser utilizada nada mas como un ajuste fino de los parámetros de la ecuación, lo que graficamente significa que se encuentre en la vecindad del mínimo de la hipersuperficie de χ^2 . Sin embargo, dado que son pocas las técnicas numéricas que pueden utilizarse en aquellos problemas en los que la solución no puede obtenerse directamente, es conveniente

analizar las diferentes modificaciones que se le pueden hacer a la técnica del gradiente con el fin de ampliar su campo de aplicación. Para esto debe estudiarse, inicialmente, de que otros parámetros depende la técnica del gradiente.

Como primera opción se estudiaron las diferencias en los valores de χ^2 para dos polinomios del mismo grado

$$.25x^2 + 3.14x - 2.37 = 0$$

$$\frac{1}{3}x^2 - 10x + 63 = 0$$

siguiendo la misma metodología utilizada anteriormente de partir de coeficientes iniciales con una (R0), dos (R1) y tres (R2) cifras significativas iguales a los coeficientes del polinomio.

En este caso las diferencias en los valores de χ^2 no fueron significativas, por lo que la técnica no depende sustancialmente de la ecuación en sí, como puede verse en la figura II.4.

A esta conclusión puede llegarse a partir del análisis de la ecuación II.3, ya que si la diferencia entre los coeficientes exactos y los aproximados es la misma, las $Q(i)$ son iguales y el valor de las $S(i)$ no se ve afectada.

Otro de los parámetros importantes a estudiar es el grado del polinomio a ajustar, para lo que se aplicó la técnica del gradiente a las ecuaciones:

$$\frac{x^3}{2} + .1x^2 - 5x - 42 = 0$$

$$\frac{x^2}{3} - 10x + 63 = 0$$

en la figura II.5 se muestran los resultados aquí obtenidos.

Las diferencias obtenidas en los valores de χ^2 para el ajuste de tres y cuatro coeficientes, partiendo de una misma precisión en ambos casos, se deben fundamentalmente a las diferencias en los sumandos $S(i)$ de la ecuación (II.3) y los sumandos equivalentes para el polinomio de tercer grado, ya que el valor de las $Q(i)$ nuevamente son equivalentes y tal diferencia no es imputable a la técnica del gradiente en sí.

Finalmente se estudió la variación de la técnica del gradiente para una misma ecuación en función del intervalo del dominio de la función en que se evaluaron los valores de x . En este caso, los intervalos escogidos fueron $x \in [-100, 100]$, $[0, 100]$, $[-10, 10]$, $[0, 10]$ nuevamente, como en el caso anterior las discrepancias en los valores de χ^2 se deben principalmente al valor de los sumandos $S(i)$ de la ecuación (II.3) y no a la técnica en sí, (ver figura II.6).

Los intervalos para $x \geq 0$ se eligieron con el fin de detectar errores de cancelación por restas de valores simétricos de $x(i)$, en los sumandos $S(i)$ de las potencias impares de la variable independiente, a lo que deben adjudicarse las diferencias en los valores de χ^2 para los dos primeros y los dos últimos intervalos seleccionados. Esto es, la técnica del gradiente mas que una dependencia de los parámetros de la ecuación a ajustar, muestra serias deficiencias en ella misma, lo que impide su aplicación en los casos más generales.

Para poder aplicar la técnica del gradiente, no como un ajuste fino de los coeficientes sino como una técnica inicial cuando aún no están definidos los valores en una primera aproximación, esta debe ser modificada sustancialmente.

La primera modificación a la técnica se deduce de la sensibilidad que esta presenta al número de cifras significativas con que se den los coeficientes iniciales, fig. II.3. Es decir, surge la posibilidad de la aplicación consecutiva de la técnica, donde los coeficientes iniciales en cada aproximación sucesiva sean los obtenidos de la etapa anterior. A esto le llamaremos: técnica múltiple del gradiente.

Los resultados obtenidos por la técnica múltiple del gradiente se pueden ver en la figura II.7, donde se muestra claramente una disminución de la sensibilidad en función de las cifras significativas, además de que es posible obtener valores de comparables con valores de errores de tipo experimental. Por otro lado, de la misma figura II.7 se ve que esta modificación no permite obtener valores de χ^2 como los obtenidos por el método de mínimos cuadrados debido a que ulteriores aplicaciones de la técnica del gradiente ya no mejoraban considerablemente la χ^2 .

En la siguiente tabla se muestran comparativamente los valores para cada uno de los coeficientes del polinomio así como los coeficientes calculados por la técnica múltiple del gradiente y los valores absolutos y relativos de las diferencias entre estos:

	x^2	x^1	x^0
teóricos	.3333	10.000	63.0
calculado	.3398	10.032	46.4
err. abs	.0036	.032	16.6
err. relat.	1.68×10^2	3.2×10^3	26×10^1

De esta tabla puede verse la sensibilidad de la técnica para ajustar los coeficientes en función del grado del polinomio asociado. Esto viene a apoyar el resultado de que la aplicación múltiple de la

técnica, llegue a una etapa tal que el valor de χ^2 ya no mejore sustancialmente, pues la técnica es casi insensible al coeficiente cero del polinomio.

Consecuentemente, con la técnica del gradiente se puede ajustar con mejor precisión a los coeficientes asociados a las mayores potencias del polinomio. Algebraicamente este resultado se justifica desarrollando la ecuación para χ^2 (II.3). Los valores de cada una de las componentes de χ^2 en función de la variación de los coeficientes viene dada por:

$$\chi_0^2 = (A_0 + A_1 x_1 + A_2 x_1^2)^2$$

$$\chi_1^2 = [(a_0 - c_0) + (a_1 - c_1) x_1 + (a_2 - c_2) x_1^2]^2$$

$$\chi_2^2 = [(a_0 - c_0) + (a_1 - c_1) x_2 + (a_2 - c_2) x_2^2]^2$$

$$\chi^2 = \chi_0^2 = A_0^2 S_0 + 2A_0 A_1 S_1 + (A_1^2 + 2A_0 A_2) S_2 + 2A_1 A_2 S_3 + A_2^2 S_4$$

$$\chi_{c_0}^2 = (A_0 - S_0)^2 S_0 - 2(A_0 - S_0) A_1 S_1 + [A_1^2 + 2(A_0 - S_0) A_2] S_2 +$$

$$A_0 \rightarrow A_0 - S_0$$

$$+ 2A_1 A_2 S_3 + A_2^2 S_4$$

$$\chi_{c_1}^2 = A_0^2 S_0 + 2A_0 (A_1 - S_1) S_1 + (A_1 - S_1)^2 S_2 + 2A_0 A_2 S_2 +$$

$$A_1 \rightarrow A_1 - S_1$$

$$+ 2(A_1 - S_1) A_2 S_3 + A_2^2 S_4$$

$$\chi_{c_2}^2 = A_0^2 S_0 + 2A_0 A_1 S_1 + [A_1^2 + 2A_0 (A_2 - S_2)] S_2 +$$

$$A_2 \rightarrow A_2 - S_2$$

$$+ 2A_1 (A_2 - S_2) S_3 + (A_2 - S_2)^2 S_4$$

$$\chi_{00}^2 - \chi_0^2 = \delta_0^2 50 - 2\delta_0 (1050 + 1151 + 1252)$$

$$\chi_{01}^2 - \chi_0^2 = \delta_1^2 52 - 2\delta_1 (1051 + 1152 + 1253)$$

$$\chi_{02}^2 - \chi_0^2 = \delta_2^2 54 - 2\delta_2 (1052 + 1153 + 1254)$$

Estas ecuaciones se pueden simplificar, con el fin de resaltar la dependencia con el grado asociado del polinomio, si se hacen iguales los incrementos en el paso para los coeficientes δ_i : así como las diferencias entre los coeficientes exactos $a(i)$ y los coeficientes aproximados $c(i)$ definidos como $Q(i)$, es decir:

$$Q(i) = Q = cte \quad \delta_i = \delta = cte.$$

finalmente se tiene:

$$\nabla = \delta^2 \begin{pmatrix} 50 \\ 52 \\ 54 \end{pmatrix} - 2\delta \begin{pmatrix} 1050 + 1151 + 1252 \\ 1051 + 1152 + 1253 \\ 1052 + 1153 + 1254 \end{pmatrix}$$

Estos resultados apuntan a una nueva modificación a la técnica del gradiente en la cual el valor de δ_i se define en función del grado asociado al coeficiente, haciendo así selectivo el coeficiente a modificar en cada una de las etapas iterativas.

A esta técnica por simplicidad se le llamará: técnica selectiva.

En la tabla 2 pueden observarse los resultados de esta técnica en donde, en cada una de las iteraciones en el programa, se selecciona el coeficiente a ajustar. Esta modificación permite en

pocas iteraciones obtener valores de \mathcal{X}' rápidamente decrecientes.

La aplicación de esta técnica como única herramienta para el ajuste de coeficientes, nos lleva a la solución aproximada sumamente lento, como puede verse de que en la decimoprimer iteración, el número de ciclos fué de 111 para lograr una corrección de $\Delta = .24984 - .24977 = .00007$ en el coeficiente de la segunda potencia del polinomio. Sin embargo, con esta modificación, se ha logrado tener una primera aproximación que permita continuar la búsqueda en la vecindad de un mínimo de la hipersuperficie de \mathcal{X}' , es decir, las primeras cifras significativas en los coeficientes ya son exactas.

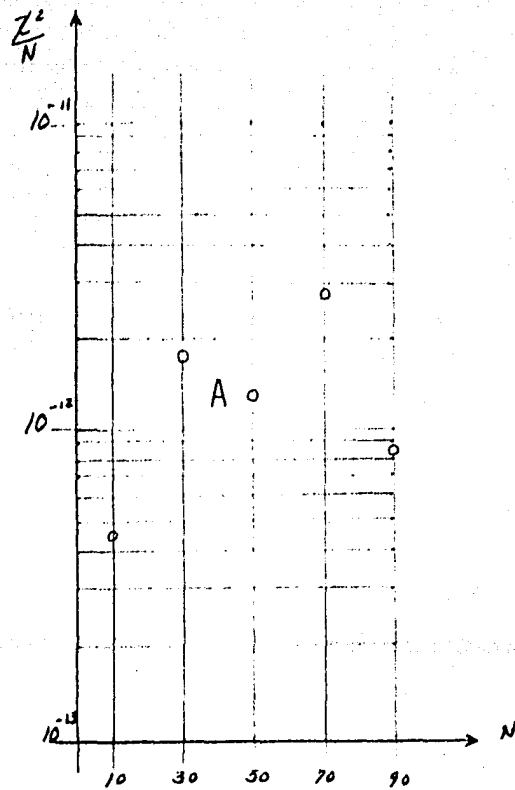
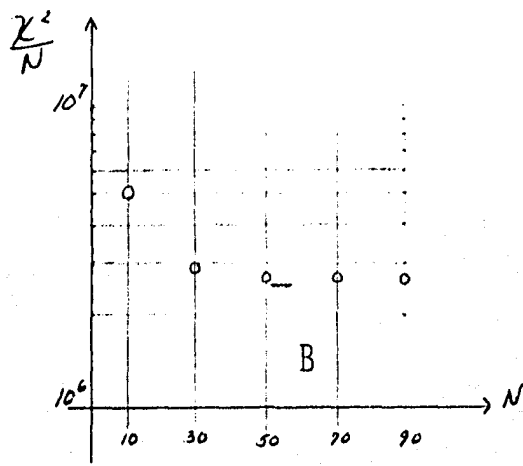


Fig. II.1

Valores de χ^2/n para $n = 10, \dots, 90$ obtenidos mediante el ajuste de los coeficientes de un polinomio:

$$.25x^2 + 7.14x - 2.37 = 0$$

por la técnica directa de Gauss-Jordan (a) y la técnica del gradiente según se reporta en la literatura (b).

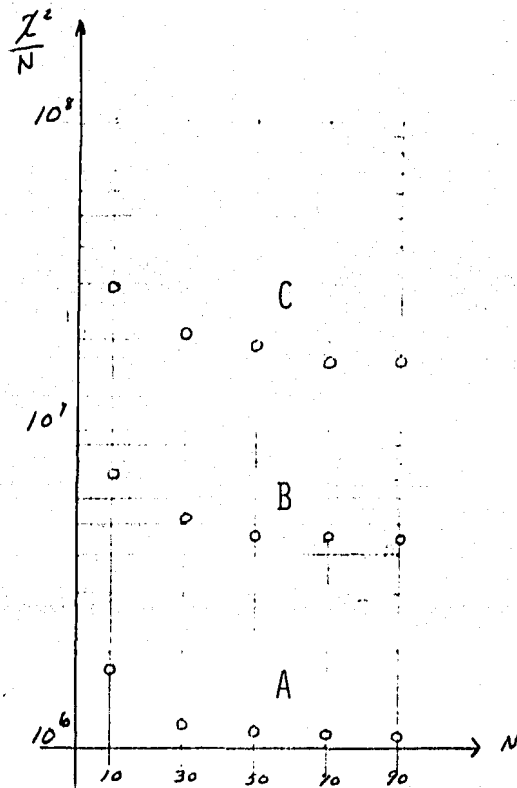


Fig. II.2

Variaciones de $\frac{\sum a_i^2}{n}$ vs. n al multiplicar la primera cifra significativa de los coeficientes del polinomio:

$$.25x^2 + .14x - 2.37 = 0$$

por un factor de 2 (a), 4 (b) y 8 (c).

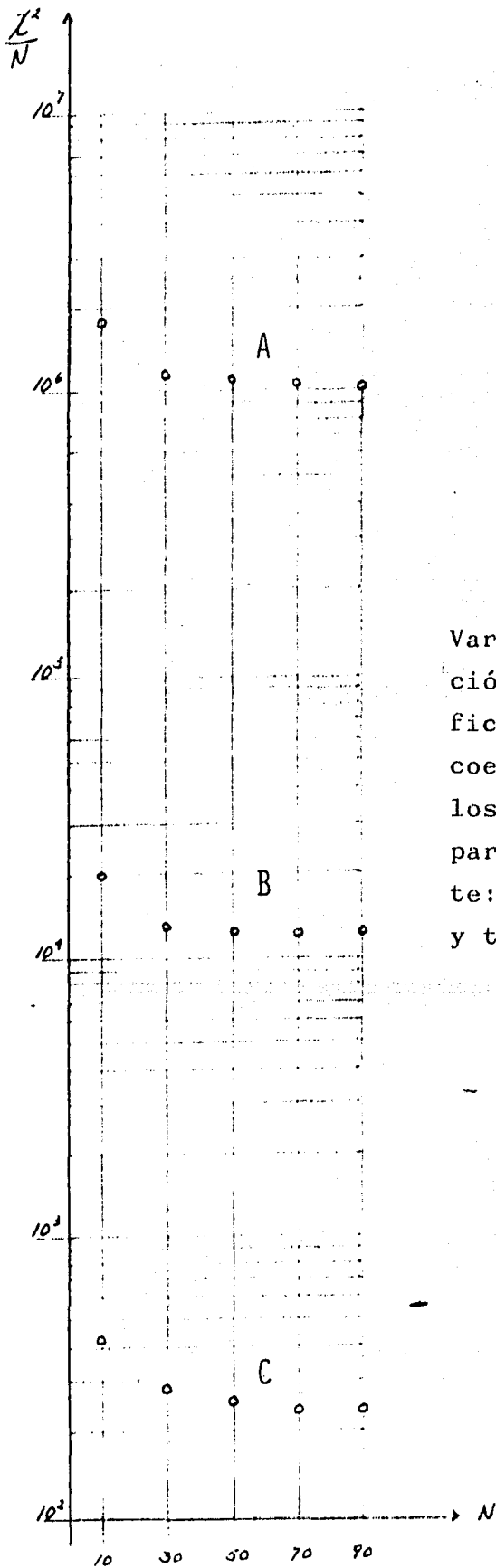


Fig. II.3

Variación de χ^2/n vs. n en función del número de cifras significativas que coinciden entre los coeficientes exactos y el valor de los coeficientes en el punto de partida en la técnica del gradiente: una cifra (a), dos cifras (b) y tres cifras (c) significativas.

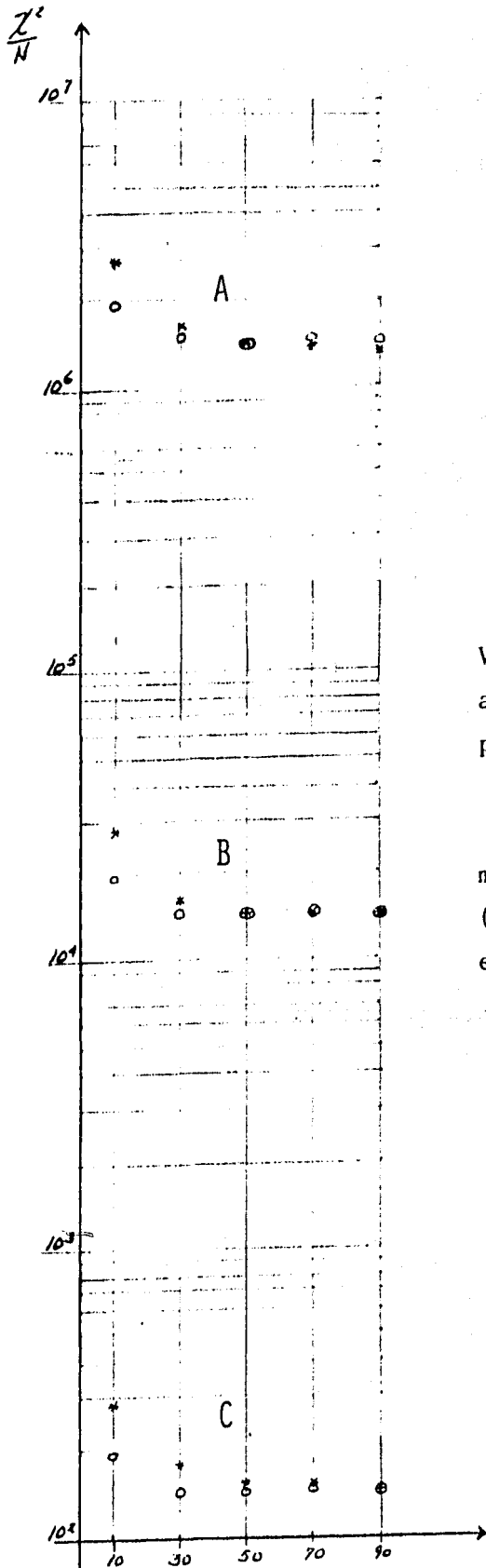


Fig. II.4

Variaciones de χ^2/n vs. n para el ajuste de los coeficientes de dos polinomios del mismo grado:

$$.25x^2 + .14x - 2.37 = 0 \quad (*)$$

$$x^2/3 - 10x + 63 = 0 \quad (o)$$

mediante una (a), dos (b) y tres (c) cifras significativas iguales en los coeficientes iniciales.

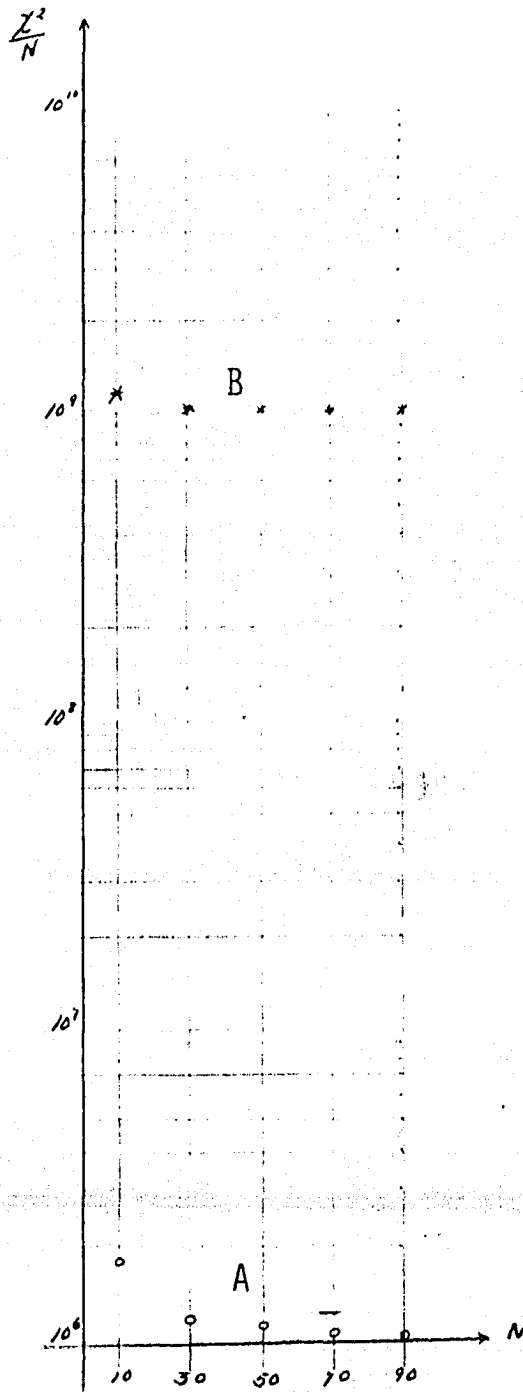


Fig. II.5

Variación de χ^2/n vs. n en función del grado del polinomio

$$x^2/3 - 10x + 63 = 0 \quad (a)$$

y $x^{3/2} + .1x^2 - 5x - 42 = 0 \quad (b)$

con una cifra significativa.

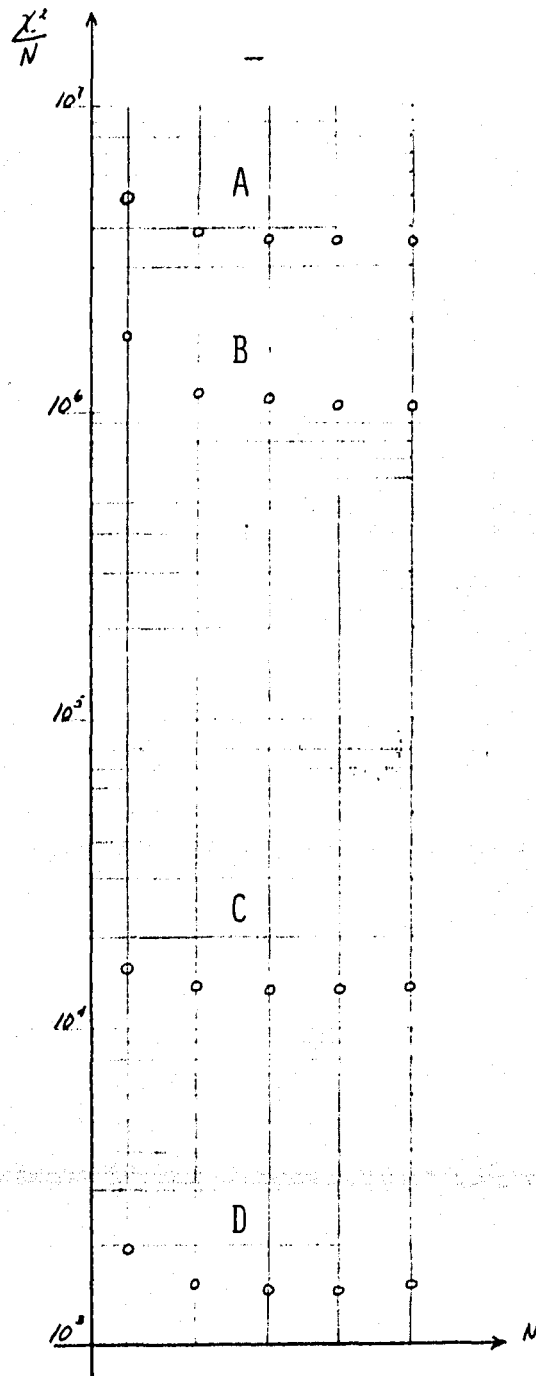


Fig. II.6

Variación de χ^2/n vs. n para el ajuste de los coeficientes de un polinomio de grado 2 en función del intervalo de las 'x' bajo observación. $|-100,100|$ (a), $|0,100|$ (b), $|-10,10|$ (c) y $|0,10|$ (d).

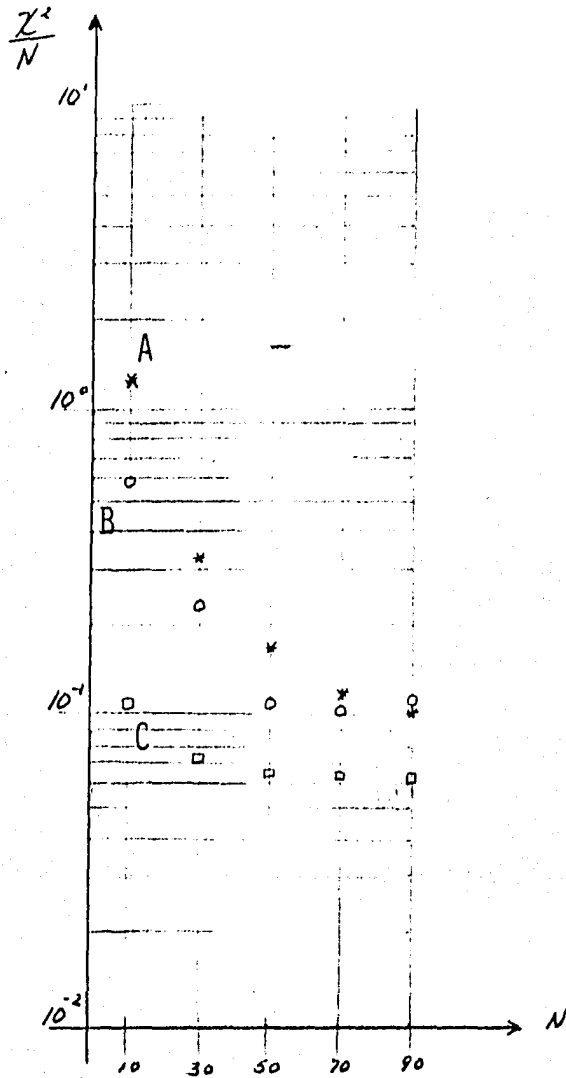


Fig. II.7

Variación de χ^2/n vs. n para el ajuste de los coeficientes de un polinomio de segundo grado por la técnica múltiple del gradiente, para una (a), dos (b) y tres (c) cifras significativas.

		x^0	x^1	x^2	
Datos exactos		-2.37	3.14	.25	
Iteración	Ciclos	$C_0 = -0.37$	$C_1 = 5.14$	$C_2 = 2.25$	x^2/N
1	26			.240	1.2E+5
2	23		3.419		1.6E+4
3	7			.248	2.2E+3
4	30		3.182		3.2E+2
5	7			.249	6.0E+1
6	44		3.149		2.4E+1
7	8			.250	1.9E+1
8	15	-1.231			1.1E+1
9	20			.250	7.2E+0
10	57	-1.697			5.0E+0
11	111			.250	3.9E+0
12	75		3.142		2.2E+0
13	201	-2.130			3.7E-2

Tabla 2.

Valores para x^2/N obtenidos mediante la técnica selectiva así como el número de ciclos realizados en cada iteración y el valor de los coeficientes C_0 , C_1 y C_2 en cada una de las mismas. El proceso hubo de truncarse al término de la iteración número 13, dado que el valor absoluto de la diferencia relativa entre dos ciclos consecutivos fue de $| \Delta x^2 / x^2 | < 1E-5$.

CONCLUSIONES

De la comparación directa de las técnicas para el ajuste de coeficientes polinomiales; la de Gauss-Jordan y la del gradiente, se vió que la última presenta serias inestabilidades, lo que tiene como resultado que el valor de χ^2 sea varios ordenes de magnitud mayores que el obtenido mediante la primera técnica. Se mostró que dichas inestabilidades provienen de errores de cancelación por el enmascaramiento de las variaciones en χ^2 , provenientes de las diferencias en los coeficientes asociados a los grados inferiores del polinomio. De aquí que la técnica del gradiente permita solamente un ajuste fino del coeficiente asociado a la máxima potencia del polinomio y un ajuste intermedio para el coeficiente de la siguiente potencia.

Se pudo mostrar que tal inestabilidad era independiente tanto del valor de los coeficientes como del grado del polinomio.

La técnica del gradiente produce valores de χ^2 fuertemente dependientes de la precisión inicial de los coeficientes que se tomen como punto de partida del proceso iterativo, lo que reduce esta técnica a su aplicación unicamente como un ajuste fino. La modificación aquí propuesta, la de la técnica múltiple del gradiente, permitió superar este último defecto, es decir, la técnica se hizo practicamente independiente de la precisión de los coeficientes iniciales.

La segunda modificación propuesta, la técnica del gradiente

selectivo, al mezclar las ideas principales de la técnica de malla y el procedimiento de la técnica del gradiente, permite resolver el problema del enmascaramiento de la influencia de los coeficientes asociados a las primeras potencias. Sin embargo, el procedimiento es sumamente lento como para poder ser aplicado como una técnica general para el ajuste de coeficientes a partir de datos experimentales, esto nos lleva a la conclusión de que la técnica a seguir debe estar formada por una combinación de los tres tratamientos a que se ha hecho mención en este trabajo.

Inicialmente, se utilizaría la técnica del gradiente selectivo; para determinar el orden de magnitud de los coeficientes, posteriormente se aplicaría la técnica múltiple del gradiente y finalmente, una vez obtenidas las primeras cifras significativas en cada uno de los coeficientes a ajustar, se aplicaría la técnica del gradiente con una interpolación parabólica con los últimos tres valores de χ^2 .

Esto nos lleva a una técnica que es independiente del grado del polinomio o de la función a ajustar y de la precisión en los coeficientes iniciales para los ciclos de iteración. La que nos permite un ajuste confiable de los coeficientes de una ecuación a partir de datos experimentales.

REFERENCIAS

- 1.- J. S. Vandergraft
'Introduction to numerical computations'
Academic Press, 2 (1978).
- 2.- Ibid., p.2
- 3.- Ibid., p.6
- 4.- D. C. Baird
'Experimentation: An introduction to measurement theory and
experiment design'
Prentice Hall, 133 (1962).
- 5.- Ibid., p.137
- 6.- B. Carnahan, H. A. Luther & J. D. Wilkes
'Applied numerical methods'
John Wiley & Son, 571 (1969).
- 7.- Ibid., p.269
- 8.- P. R. Bevington
'Data reduction and error analysis for the physical sciences'