REVISTA CON-CIENCIA N°1/VOL. 3 (2015) 77-86

8

Efecto de la interpolación respecto al error en una aplicación

ZOTA UÑO, VIRGINIA

CORRESPONDENCIA:
VIRZOTAU@YAHOO.COM

FECHA DE RECEPCIÓN: 3 DE MARZO DE 2015 FECHA DE ACEPTACIÓN: 8 DE ABRIL DE 2015

Resumen

El artículo tiene la finalidad de mostrar la alternativa a ajustes o mínimos cuadrados, mediante la interpolación polinómica, en temas de aplicación en el área de la Biofarmacia y otras áreas de especialidad, en la Química Farmacéutica o Bioquímica.

Para el objetivo se desarrolla de forma muy sintética ajuste lineal, exponencial y cuadrático para comparar con la interpolación polinómica.

Éste último es más conveniente porque involucra todos los puntos con margen de error cero, lo que no sucede cuando se trata de ajustes y la situación es peor si se considera para determinar la imagen de algún punto que no forma parte de la información tomando un par de puntos que le contienen. En éste caso la muestra inicial como tal no tiene sentido, sólo habría que tomar un par de puntos próximos como muestra.

Abstract

The article has the purpose of showing the alternative to adjustments or least squares, the polinominal interpolation, in topics of application in the area of the Biopharmaceutics and other areas of speciality, in the Pharmaceutical chemistry or Biochemical.

For the develops of very synthetic form linear, exponential and quadratic fit to compare with the polinominal interpolation.

The latter is more suitable because it involves all the points with margin of mistake zero, which does not happen when it is a question of adjustments and the situation is worse if it is considered to determine the image of some point that does not form a part of the information taking a couple of points that they contain. In this case the initial sample as such sense does not have, only there would be necessary to take a couple of next points as a sample.

1 Docente de la Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Bioquímicas, Universidad Mayor de San Andrés.

PALABRAS CLAVE
Ajuste lineal, ajuste exponencial, ajuste cuadrático e interpolación polinómica.

KEY WORDS
Linear fit, exponential fit, quadratic fit and polynomial interpolation setting.

INTRODUCCIÓN

Dado un conjunto finito de puntos (no alineados en forma vertical) es posible ajustar mediante una recta, parábola o una exponencial; sin embargo, éstas sólo aproximan al conjunto de puntos y no necesariamente de una forma muy óptima, podría presentar errores bastante grandes.

En la interpolación, se representa al conjunto de puntos mediante un polinomio, que pasa por todos los puntos, en consecuencia el error es cero.

Cuando se trata de un ajuste lineal el interés es encontrar, su pendiente y la ordenada al origen, que sólo son próximos, además dependiendo de la característica de los puntos, éstas tendrán algo de utilidad en un subconjunto no para la totalidad. Mientras que en la interpolación al evaluar el polinomio en cero se obtiene su ordenada y la pendiente es la derivada del polinomio en cualquier punto, pero la mayor ventaja es el trabajo con la totalidad de los puntos.

Para formalizar el comportamiento en ambos casos, consideremos el siguiente conjunto de puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{n}$ tal que los puntos no están alineados en forma vertical (en un experimento al mismo tiempo no se obtiene diferentes resultados).

AJUSTE LINEAL

Se busca encontrar una recta que aproxime a todos los puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{n}$, sea representada por la siguiente expresión:

$$Y = ax + b$$

Entonces con los $n + 1$ puntos se construye un sistema de ecuaciones lineales de $n + 1$ ecuaciones con dos incógnitas.

PUNTO	ECUACIÓN
(x_0,y_0)	$ax_0 + b = y_0$
(x_1,y_1)	$ax_1 + b = y_1$
(x_2,y_2)	$ax_2 + b = y_2$
(x_3,y_3)	$ax_3 + b = y_3$
$\vdots$	$\vdots$
(x_n,y_n)	$ax_n + b = y_n$

El sistema de forma organizada y para efectos de aplicación se expresa de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} x_0 & 1 \\ x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \binom{a}{b} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_0 x_1 x_2 \cdots x_n \\ 1\ 1\ 1 \cdots 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 & 1 \\ x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix} \binom{a}{b} = \begin{pmatrix} x_0 x_1 x_2 \cdots x_n \\ 1\ 1\ 1 \cdots 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & n+1 \end{pmatrix} \binom{a}{b} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \end{pmatrix}$$

EXPONENCIAL

Si el comportamiento de los puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{n}$ presenta una característica exponencial, sus ordenadas son estrictamente positivas ($y > 0$), es conveniente emplear ajuste exponencial $Y=ae^{bx}$ con la finalidad de reducir el margen de error.

Para el objetivo la forma más natural es presentar como expresión lineal, esto será posible al aplicar logaritmos.

$$\ln Y = \ln (ae^{bx})$$
$$\ln Y = \ln a + bx$$

Luego el sistema de ecuaciones lineales en los puntos de la información es:

PUNTO	ECUACIÓN
(x_0, y_0)	$bx_0 + \ln a = \ln y_0$
(x_1, y_1)	$bx_1 + \ln a = \ln y_1$
(x_2, y_2)	$bx_2 + \ln a = \ln y_2$
(x_3, y_3)	$bx_3 + \ln a = \ln y_3$
$\vdots$	$\vdots$
(x_n, y_n)	$bx_n + \ln a = \ln y_n$

Al operar del mismo modo que en el caso correspondiente al ajuste lineal, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & n+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ \ln a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i \ln y_i \\ \sum_{i=0}^{n} \ln y_i \end{pmatrix}$$

La solución al sistema proporciona los coeficientes $\ln a$ y b buscados para el ajuste exponencial $\ln Y = \ln a + bx$, que expresada en su forma exponencial es la ecuación buscada:

$$Y = e^{\ln a} e^{bx}$$

CUADRÁTICO

Esta vez el objetivo es ajustar al conjunto de puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{n}$ mediante una ecuación de segundo grado:

$$Y = ax^2 + bx + c$$

PUNTO	ECUACIÓN
(x_0,y_0)	$ax_0^2 + bx_0 + c = y_0$
(x_1,y_1)	$ax_1^2 + bx_1 + c = y_1$
(x_2,y_2)	$ax_2^2 + bx_2 + c = y_2$
(x_3,y_3)	$ax_3^2 + bx_3 + c = y_3$
$\vdots$	$\vdots$
(x_n,y_n)	$ax_n^2 + bx_n + c = y_n$

De manera análoga al realizado en el caso lineal, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^4 & \sum_{i=0}^{n} x_i^3 & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^3 & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \sum_{i=0}^{n} x_i & n+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} x_i^2 y_i \\ \sum_{i=0}^{n} x_i y_i \\ \sum_{i=0}^{n} y_i \end{pmatrix}$$

La solución a éste sistema proporciona los coeficientes a, b y c del polinomio de segundo grado que ajusta los $n + 1$ puntos.

Como ya referimos la solución a los sistemas de ecuaciones lineales determinan los coeficientes de la recta, la exponencial o la parábola que ajusta, luego el error E es:

$$E = \sum_{i=0}^{n} (Y_i - y_i)^2$$

INTERPOLACIÓN POLINÓMICA

A diferencia de los ajustes encontrados para los $n + 1$ puntos que sólo aproximan, ahora se busca un polinomio de interpolación que pase por todos los puntos, en consecuencia el grado de éste será a lo más n, hecho que origina un sistema de $n + 1$ ecuaciones lineales con $n + 1$ incógnitas, esto es:

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 +. .. + a_nx^n$$

Luego el sistema generado por los puntos $\{(x_i, y_i)\}^{n}_{i=0}$ es:

Punto Ecuación

PUNTO	ECUACIÓN
(x_0,y_0)	$a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^{\;2} + a_3x_0^{\;3} +. .. + a_nx_0^{\;n} = y_0$
(x_1,y_1)	$a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^{\;2} + a_3x_1^{\;3} +. .. + a_nx_1^{\;n} = y_1$
(x_2,y_2)	$a_2 + a_1x_2 + a_2x_2^{\;2} + a_3x_2^{\;3} +. .. + a_nx_2^{\;n} = y_2$
(x_3,y_3)	$a_0 + a_1x_3 + a_2x_3^{\;2} + a_3x_3^{\;3} +. .. + a_nx_3^{\;n} = y_3$
$\vdots$	$\vdots$
(x_n,y_n)	$a_0 + a_1x_n + a_2x_n^{\;2} + a_3x_n^{\;3} +. .. + a_nx_n^{\;n} = y_n$

Finalmente la solución al sistema determina los coeficientes a_i, i=0,1,2,...n del polinomio de interpolación, en éste caso a diferencia de las anteriores el error es 0.

Algunos elementos útiles se encuentran en $P(0)$ que es la ordenada al origen y la pendiente se encuentra en la derivada del polinomio evaluada en cualquier valor x_i.

APLICACIÓN

Después de desarrollar unas cápsulas de 20mg de piroxicam en micropartículas, se realizó un estudio de velocidad de disolución en el que se obtuvieron los datos de las cantidades medias de fármaco disuelto que se muestran en la siguiente tabla:

Tabla 1. Datos medios de cantidades disueltas de piroxicam.

Tiempo (min)	Q (mg)
5	0,64
10	1,27
20	2,54
30	3,81
60	7,62
90	11,43
120	15,24
180	19,86
240	19,98

Sabiendo que el proceso de disolución sigue una cinética de orden cero, calcule la constante de disolución que rige el proceso.

Para mostrar de forma objetiva el comportamiento de ajustes e interpolación, se tomará un tiempo de 150 min., por ajuste lineal, recta por dos puntos próximos e interpolación polinómica.

- **Ajuste lineal**

El sistema correspondiente a ajuste lineal es:

$$\begin{pmatrix} 117525 & 755 \\ 755 & 9 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11865.7 \\ 82.39 \end{pmatrix}$$

Luego $a = 0.09142269838$ y $b = 1.485095858$, por tanto la ecuación de la recta que ajusta es:

$Y = 1.485095858 + 0.09142269838x$

Si $x = 150$, resulta $Y = 15.19850061$, con un error $E = 51.93762917$.

Ordenada al origen **1.485095858** y pendiente **0.09142269838**.

- **Puntos próximos** a **150**, a saber **(120,15.24), (180,19.86)**

La recta determinada por éstas es: $Y = 6 + 0.077x$

Luego si $x = 150$, por tanto $Y = 17.55$ con error $E = 51$.

Ordenada al origen **6** y pendiente **0.077**.

- **Interpolación polinómica**

El sistema a resolver es:

$$\begin{pmatrix}
1.0 & 5.0 & 25.0 & 125.0 & 625.0 & 3125.0 & 15625.0 & 78125.0 & 390625.0 \\
1.0 & 10.0 & 100.0 & 1000.0 & 10000.0 & 100000.0 & 1000000.0 & 10000000.0 & 100000000.0 \\
1.0 & 20.0 & 400.0 & 8000.0 & 160000.0 & 3200000.0 & 64000000.0 & 1280000000.0 & 25600000000.0 \\
1.0 & 30.0 & 900.0 & 27000.0 & 810000.0 & 24300000.0 & 729000000.0 & 21870000000.0 & 6.561\ 10^{11} \\
1.0 & 60.0 & 3600.0 & 216000.0 & 12960000.0 & 777600000.0 & 46656000000.0 & 2.79936\ 10^{12} & 1.679616\ 10^{14} \\
1.0 & 90.0 & 8100.0 & 729000.0 & 65610000.0 & 5904900000.0 & 5.31441\ 10^{11} & 4.782969\ 10^{13} & 4.3046721\ 10^{15} \\
1.0 & 120.0 & 14400.0 & 1728000.0 & 207360000.0 & 24883200000.0 & 2.985984\ 10^{12} & 3.5831808\ 10^{14} & 4.29981696\ 10^{16} \\
1.0 & 180.0 & 32400.0 & 5832000.0 & 1049760000.0 & 1.889568\ 10^{11} & 3.4012224\ 10^{13} & 6.12220032\ 10^{15} & 1.101996058\ 10^{18} \\
1.0 & 240.0 & 57600.0 & 13824000.0 & 3317760000.0 & 7.962624\ 10^{11} & 1.91102976\ 10^{14} & 4.586471424\ 10^{16} & 1.100753142\ 10^{19}
\end{pmatrix}$$

$$* \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \\ x_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.64 \\ 1.27 \\ 2.54 \\ 3.81 \\ 7.62 \\ 11.43 \\ 15.24 \\ 19.86 \\ 19.98 \end{pmatrix}$$

Al resolver el sistema se obtiene:

$$\begin{pmatrix} 0.02068636501 \\ 0.1221761576 \\ 0.000415635 \\ -0.00001755080667 \\ 0.0000004024861675 \\ -0.000000005219829336 \\ 3.788075139\ 10^{-11} \\ -1.414571428\ 10^{-13} \\ 2.070479895\ 10^{-16} \end{pmatrix}$$

Por consiguiente la expresión del polinomio de interpolación encontrado es:

$$\begin{aligned} P(x) = {} & 0.02068636501 + 0.1221761576x + 0.000415635x^2 - 0.0000175080667x^3 \\ & + 0.0000004024861675x^4 - 0.000000005219829336x^5 + 3.788075139 \\ & * 10^{-11}x^6 - 1.414571428 * 10^{-13}x^7 + 2.070479895 * 10^{-16}x^8 \end{aligned}$$

En éste caso $E = 0$.

Algunos elementos relevantes:

La ordenada al origen es $P(0) = 0.02068636501$:

La pendiente varía de acuerdo a la ubicación de los puntos, ésta información es posible determinar al evaluar en la derivada $P'(x)$ del polinomio $P(x)$ encontrado en cualquier punto.

Para el ejemplo en consideración, la derivada es:

$$P'(x) = 0.1221761576 + 2 * 0.000415635x - 3 * 0.0000175080667x^2 + 4 * 0.0000004024861675x^3 - 5 * 0.000000005219829336x^4 + 6 * 3.788075139 * 10^{-11}x^5 - 7 * 1.414571428 * 10^{-13}x^6 + 8 * 2.070479895 * 10^{-16}x^7$$

$$= 0.1221761576 + 0.00083127x - 0.0000525242001x^2 + 0.00000160994467x^3 - 0.00000002609914668x^4 + 0.000000002272845083x^5 - 9.901999996 * 10^{-13}x^6 + 1.656383916 * 10^{-15}x^7$$

La pendiente para los diferentes tiempos dados son los siguientes:

$P'(5)$ = 0.1252050286

$P'(10)$ = 0.1266071456

$P'(20)$ = 0.1271616292

$P'(30)$ = 0.1270080577

$P'(60)$ = 0.1276428224

$P'(90)$ = 0.1279128321

$P'(120)$ = 0.1280022372

$P'(180)$ = -02985889411

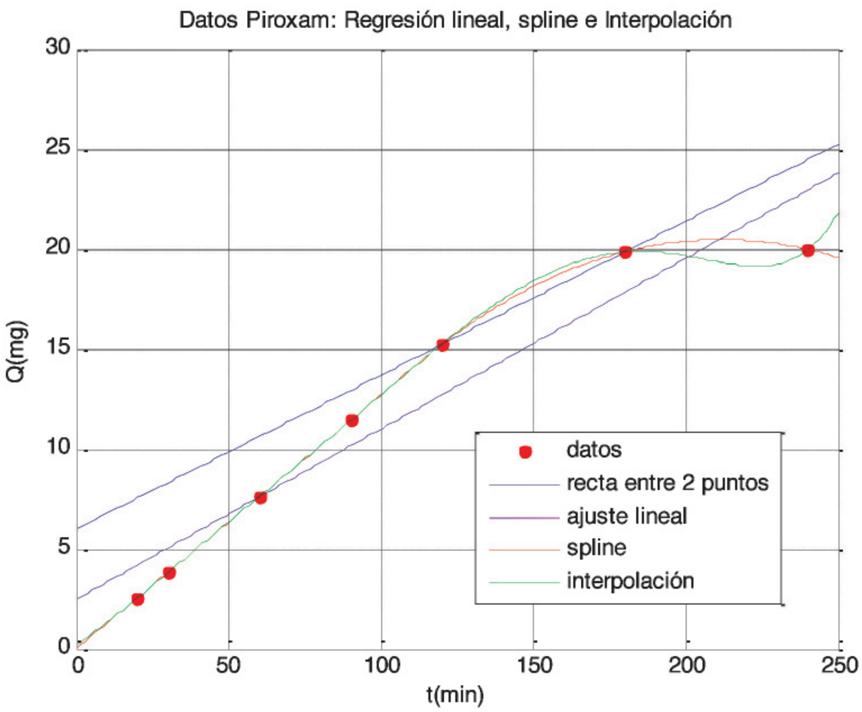
$P'(240)$ = 0.6789735748

Si la necesidad es de pronto saber la ordenada y pendiente en un tiempo al margen de los datos, es suficiente evaluar en el polinomio de interpolación y la derivada, encontremos éstos valores para ***tiempo* = 150**

$P(150)$ = 18.69953593

$P'(150)$ = 0.09645009795

La gráfica permite apreciar la diferencia entre ajustes e interpolación además de considerar una recta entre dos puntos, para apreciar el margen de error que se comete.



CONCLUSIÓN

La necesidad de aplicar a un conjunto de datos obtenidos a partir de una información, es necesario interpolar, saber la imagen de un determinado valor que no forma parte de la información original. Para éste efecto lo común que se hace es considerar un par de puntos próximos al valor para el que se desea interpolar, éste hecho exige que se descarte los demás puntos; por consecuencia, el margen de error es mayor inclusive al determinado por ajuste lineal u otro ajuste, entonces se encontrará una pendiente válida sólo el par en consideración y la ordenada al origen no tiene ninguna coherencia con la información.

Sin embargo, la determinación del polinomio de interpolación o en su caso splines, permite conseguir un polinomio que pasa por todos los puntos, por tanto, el error es cero, además de considerar toda la información. En éste caso para determinar la pendiente, es suficiente evaluar para el valor que se necesita conocer su pendiente, en la derivada del polinomio encontrado, y para encontrar la ordenada al origen basta evaluar el polinomio en cero.

Por consecuencia, la determinación del polinomio de interpolación, presenta mayor utilidad en su aplicación, inclusive para conocer el área determinado por los puntos.

REFERENCIAS

Aguilar, R. Antonio. Caamaño, S. Manuel. Martin, M. Felix R. Montejo, R. Maria C. (2014) Biofarmacia y Farmacocinética. España: Elsevier. Pag. 36-37.

Nogales V. Jorge A., Casteñeta M. Heriberto, Zota U. Virginia (2014) Introducción a la termodinámica con derivadas parciales. Bolivia: Revista CONCIENCIA.

Zota, U. Virginia. (2006) Métodos Numéricos con Aplicaciones. Bolivia: La Paz

Zota, U. Virginia. (2001) Geometría Analítica y Cálculo: Bolivia: La Paz

MatLab R2014a

Castellan Gilbert, W. (1980) Fisicoquímica. University of Maryland.