

## **TRABAJO ESPECIAL DE GRADO**

### **DESARROLLO DE UN PROGRAMA MODULAR PARA EL AJUSTE DE DATOS EXPERIMENTALES CON MODELOS NO LINEALES**

TUTOR ACADÉMICO: Prof. José Papa A.  
TUTOR ACADÉMICO: Prof. César Pérez

Presentado ante la ilustre Universidad  
Central de Venezuela para optar al  
Título de Ingeniero Químico por el  
Br. Bazó C., Pedro J.

**Caracas, Noviembre de 2002**

Caracas, 8 de Noviembre de 2002

Los abajo firmantes, miembros del jurado designado por el Consejo de la Escuela Ingeniería Química, para evaluar el Trabajo Especial de Grado presentado por el Bachiller Pedro Jesús Bazó Canelón, titulado:

**“DESARROLLO DE UN PROGRAMA MODULAR PARA EL AJUSTE DE DATOS  
EXPERIMENTALES CON MODELOS NO LINEALES”**

Consideran que el mismo cumple con los requisitos exigidos por el plan de estudios conducente al Título de Ingeniero Químico, y sin ello signifique que hacen solidarios con las ideas expuestas por el autor, lo declaran **APROBADO**.

---

Prof. José Papa  
(Tutor Académico)

---

Prof. César Pérez  
(Tutor Académico)

---

Prof. José Hernández  
(Jurado)

---

Prof. Samir Marzuka  
(Jurado)

*A Dios*  
*A mi querida y amada esposa, Leticia,*  
*A mi querida y graciosa hija, Isabel Cristina,*  
*A mis queridos y comprensivos padres, Guillermo y Rosita, Efrén y Lucía*  
*A mis queridos y valerosos hermanos, Auxi, César, Abelardo, Ignacio, Elía, Wiston, Emilia, Francisco y Oswaldo,*  
*A mis queridos y generosos tíos, Belén y Pedro,*  
*Y a toda mi gran familia y amigos en general.*

*Pon un motivo sobrenatural a tu  
ordinaria labor profesional,  
y habrás santificado el trabajo.*

*Josemaría Escrivá. Camino, 359.*

## **GRACIAS**

*A mi esposa e hija,  
A mis padres y hermanos,  
A mis tíos, primos, familiares y amigos,  
A mis tutores, Prof. José Papa y Prof. César Pérez,  
A mi jurado, Prof. José Hernández,  
por todo el apoyo y dedicación  
que hicieron posible este imposible.*

**Bazó C., Pedro J.**

**DESARROLLO DE UN PROGRAMA MODULAR PARA EL AJUSTE DE DATOS  
EXPERIMENTALES CON MODELOS NO LINEALES**

**Tutor Académico: Prof. José Papa. Tutor Académico: Prof. César Pérez.  
Tesis. Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química. Año  
2002, 101 p.**

**Palabras claves:** Optimización, minimización o maximización de funciones no lineales, ajuste de datos experimentales a un modelo matemático, ajuste de parámetros, métodos de optimización.

En el campo de la ingeniería química casi todo proceso de investigación involucra el desarrollo de modelos matemáticos que intentan aproximar lo mejor posible la realidad física del proceso en estudio. Estos modelos por lo general involucran a su vez parámetros que deben ser ajustados. Esto indefectiblemente conduce a un problema de optimización.

En los cursos de pregrado de las distintas universidades se acostumbra usar modelos de optimización muy sencillos que no necesitan de técnicas especiales para resolverlos. Ahora, cuando se hace investigación, con frecuencia se genera una serie de modelos que deben ser ajustados a los datos experimentales mediante técnicas de regresión especiales, bien sea por la complejidad del modelo (que muchas veces involucra la resolución de ecuaciones diferenciales), o bien sea por la cantidad de datos experimentales que hace muy tediosa, por no decir imposible, el ajuste de los parámetros.

Una técnica de regresión frecuentemente utilizada es la de mínimos cuadrados, pero su versión standard no es aplicable a modelos no lineales.

Cuando se estudia la cinética de reacciones químicas en sistemas complejos, con regularidad se desarrollan modelos que no son lineales ni linealizables con respecto a sus parámetros, razón por la cual el método de mínimos cuadrados no puede utilizarse. Para el dimensionamiento de los equipos utilizados en operaciones y procesos químicos, invariablemente se requiere de información, muchas veces bajo la forma de modelos con parámetros y límites de confiabilidad conocidos. Estos modelos son el producto del análisis de datos experimentales y de su interpretación y ajuste mediante técnicas apropiadas.

Cuando los modelos de los procesos son no lineales, como los que incorporan reacciones químicas catalíticas, hacen falta programas de fácil adaptabilidad al sistema experimental utilizado. Las técnicas matemáticas son conocidas pero raramente se presentan unificadas con soportes de evaluación para los modelos a desarrollar.

En la Escuela de Ingeniería Química de la UCV se han desarrollado programas que han rendido considerables frutos en términos de casos tratados, como el programa M3D desarrollado por el Dr. Papa. También se han explorado algunas técnicas de regresión, como el programa de búsqueda directa (optnov) implementado por Buzzi Ferraris. Sin

embargo nunca se han agrupado y evaluado en conjunto. Además se hicieron con compiladores que hace algún tiempo desaparecieron del mercado, y además ya están desactualizados y son poco compatibles con los sistemas operativos actuales, especialmente Windows 95/98/NT/Me/2000/XP. Ha llegado el momento y la necesidad de contar con un sistema ágil y bien fundamentado para su utilización en los proyectos de laboratorio venideros.

En cuanto al problema de conseguir el óptimo en una función de múltiples variables que se presenta en muchos campos de la ingeniería, de la física, de la matemática, etc. No siempre se consigue. A menudo como en el caso de sistemas con reacciones químicas es suficiente obtener una mejora en la función objetivo. A menudo es indispensable establecer limitaciones a las variables independientes y no siempre es posible superar tal dificultad modificando adecuadamente una función objetivo.

Todas estas limitaciones deben ser consideradas en el desarrollo de un método general de optimización.

En estas últimas décadas han sido propuestos numerosos métodos fundamentados en diferentes criterios. Entre los más importantes se mencionan los siguientes:

- Método de búsqueda directa (Implementado por Hooke y Jeeves).
- Método de búsqueda directa (Implementado por Buzzi Ferraris).
- Método de simplex modificado.
- Método de Gauss Newton.
- Método de máxima pendiente.
- Método de Levenberg Marquardt.

En este trabajo de grado se desarrollo un software que es capaz de aplicar los algoritmo de los métodos antes mencionados, de una manera muy sencilla, además la aplicación presenta ciertas bondades, que son de gran utilidad para el investigador, y todas estas se encuentran claramente explicadas en el manual del usuario que se entrega como libro anexo a este a este trabajo.

# ÍNDICE GENERAL

<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b>	<b>V</b>
<b>ÍNDICE DE TABLAS</b>	<b>VII</b>
<b>NOMENCLATURA</b>	<b>VIII</b>
<b>1. OBJETIVOS</b>	<b>1</b>
1.1. OBJETIVO PRINCIPAL	1
1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	1
<b>2. METODOLOGÍA UTILIZADA</b>	<b>2</b>
<b>3. ACTIVIDADES</b>	<b>3</b>
<b>4. MARCO TEÓRICO</b>	<b>4</b>
4.1. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA	5
4.2. FUNCIONES OBJETIVO POR MÍNIMOS CUADRADOS	7
4.3. REGRESIÓN PARA SISTEMAS LINEALES Y NO LINEALES	9
4.3.1. REGRESIONES QUE INVOLUCRAN SISTEMAS LINEALES Y NO LINEALES CON UNA ÚNICA RESPUESTA	10
4.3.2. REGRESIONES QUE INVOLUCRAN SISTEMAS LINEALES Y NO LINEALES CON RESPUESTAS MÚLTIPLES	10
4.4. CRITERIOS COMÚNMENTE UTILIZADOS EN PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN	12
4.5. PRINCIPALES MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN	14
4.5.1. MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA (HOOKE Y JEEVES)	14
4.5.2. SIMPLEX FLEXIBLE	15
4.5.3. MÉTODO DE GAUSS NEWTON	20
4.5.4. MÉTODO DE MÁXIMA PENDIENTE	22
4.5.5. MÉTODO DE LEVENBERG MARQUARDT	23
4.5.3. MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA (BUZZI FERRARIS)	24
4.6. CONSIDERACIONES FINALES	25
<b>5. ESQUEMA DE FUNCIONAMIENTO DEL PROGRAMA</b>	<b>28</b>
<b>6. RESULTADOS A REPORTAR POR EL PROGRAMA</b>	<b>31</b>
6.1. ANÁLISIS DE VARIANCIAS.	31
6.2. ANÁLISIS DE VARIANCIAS SOBRE LA REGRESIÓN.	32
6.3. ÍNDICE DE CORRELACIÓN, PENDIENTE Y CORTE CON EL EJE DE LAS ABCISAS.	33
6.4. RESPUESTAS TEÓRICAS	35

<b>7. EJEMPLOS DE APLICACIÓN</b>	<b>36</b>
<b>8. PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS</b>	<b>41</b>
8.1. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 1.	41
8.2. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 2.	41
8.3. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 3.	42
8.4. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 4.	43
8.5. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 1	43
8.6. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 2	45
8.7. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 3	48
8.8. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 4	49
<b>9. CONCLUSIONES</b>	<b>51</b>
<b>10. RECOMENDACIONES</b>	<b>53</b>
<b>11. REFERENCIAS</b>	<b>54</b>
<b>APÉNDICE A. RESULTADOS DETALLADO DE LOS PROBLEMAS PROPUESTOS</b>	<b>55</b>
INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 1	56
INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 2	67
INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 3	74
INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 4	80
<b>APÉNDICE B. PROTOTIPOS DE LAS RUTINAS DE OPTIMIZACIÓN</b>	<b>96</b>
PROTOTIPO DEL MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA IMPLEMENTADO POR HOOKE Y JEEVES	96
PROTOTIPO DEL MÉTODO DE SIMPLEX FLEXIBLE	97
PROTOTIPO DEL MÉTODO DE GAUSS NEWTON	98
PROTOTIPO DEL MÉTODO DE MÁXIMA PENDIENTE	99
PROTOTIPO DEL MÉTODO DE LEVENBERG MARQUARDT	100
PROTOTIPO DEL MÉTODO DE BUZZI FERRARIS	101



## ÍNDICE DE FIGURAS

**FIGURA 2.2.1.** INTERPRETACIÓN GEOMÉTRICA DE MÍNIMOS CUADRADOS PARA MODELOS NO LINEALES: (A) ESPACIO DE OBSERVACIÓN (TERCERA DIMENSIÓN) Y (B) ESPACIO DE LOS PARÁMETROS (DOS PARÁMETROS). 8

**FIGURA 4.2.2.** INTERPRETACIÓN DE LOS VECTORES DE LOS RESIDUOS COMO NORMAL EN LA SUPERFICIE DE ESTIMACIÓN DE  $\underline{F}$ : (A) ESPACIO DE OBSERVACIÓN (TERCERA DIMENSIÓN), (B) ESPACIO DE LOS PARÁMETROS (DOS PARÁMETROS), (C) VECTOR NORMAL  $\underline{A}$  EN VISTA ESPACIAL ( $\underline{F}$  ES LA MEJOR ESTIMACIÓN DEL MODELO MIENTRAS QUE  $\tilde{F}$  ES UNA POBRE ESTIMACIÓN Y (D) ESPACIO DE OBSERVACIÓN EXPERIMENTAL (DOS VARIABLES INDEPENDIENTES) 9

**FIGURA 4.5.2.1.** SIMPLEX REGULAR PARA DOS Y TRES PARÁMETROS INDEPENDIENTES. LOS EXTREMOS (1) REPRESENTAN LAS ALTERACIONES MÁS BAJAS. LOS PUNTOS DE FLECHA SEÑALAN LA DIRECCIÓN DE MEJORA. (A) SIMPLEX CON DOS VARIABLES. (B) SIMPLEX CON TRES VARIABLES. 16

**FIGURA 4.5.2.2.** SECUENCIAS DE SIMPLEX OBTENIENDO UNA MINIMIZACIÓN DE UNA FUNCIÓN OBJETIVO DE MÍNIMOS CUADRADOS: (A) SIMPLEX REGULAR, (B) SIMPLEX DE TAMAÑO VARIABLE. 17

**FIGURA 4.6.1.** REPRESENTACIÓN GEOMÉTRICA DE LA FUNCIÓN OBJETIVO DE MÍNIMOS CUADRADOS  $\phi$ ,  $\nabla\phi$  Y LA DIRECCIÓN DE MÁXIMA PENDIENTE,  $-\nabla\phi$ , EN EL ESPACIO DE PARÁMETROS EN EL PUNTO  $P$ . 25

**FIGURA 4.6.2.** UNA DESVENTAJA DEL MÉTODO DE MÁXIMA PENDIENTE. 26

**FIGURA 5.1.** ESQUEMA GENERAL DE FUNCIONAMIENTO DE LA APLICACIÓN. 29

**FIGURA 7.1.** ESQUEMA DE REACCIÓN QUE DIO ORIGEN AL MODELO MATEMÁTICO. 38

**FIGURA 8.1.1.** GRÁFICO DEL ESPACIO DE LA FUNCIÓN OBJETIVO CON RESPECTO A LOS PARÁMETROS (PROBLEMA 1). 43

**FIGURA 8.1.2.** GRÁFICA DE LA RESPUESTAS TEÓRICAS VS. LAS RESPUESTAS EXPERIMENTALES DEL PROBLEMA 1. 45

**FIGURA 8.2.1.** GRÁFICA DEL LA SUPERFICIE DEL MODELO MATEMÁTICO DEL PROBLEMA 2 A  $\beta_1$  CONSTANTE. 46

**FIGURA 8.2.2.** GRÁFICA DEL LA SUPERFICIE DEL MODELO MATEMÁTICO DEL PROBLEMA 2 A  $\beta_2$  CONSTANTE. 46

**FIGURA 8.2.3.** GRÁFICA DEL LA SUPERFICIE DEL MODELO MATEMÁTICO DEL PROBLEMA 2 A  $\beta_3$  CONSTANTE. 46

**FIGURA 8.2.4.** GRÁFICA DE LA RESPUESTAS TEÓRICAS VS. LAS RESPUESTAS EXPERIMENTALES DEL PROBLEMA 2. 47

**FIGURA 8.3.1.** GRÁFICO DEL ESPACIO DE LA FUNCIÓN OBJETIVO CON RESPECTO A LOS PARÁMETROS (PROBLEMA 3). 48

**FIGURA 8.4.2.** GRÁFICA DE LA RESPUESTAS TEÓRICAS VS. LAS RESPUESTAS EXPERIMENTALES DEL PROBLEMA 4.

50

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>TABLA 4.5.2.1.</b> COORDENADAS INICIALES DE LOS VÉRTICES DEL SIMPLEX.	18
<b>TABLA 8.1.1.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA 85 ITERACIONES DEL PROBLEMA 1.	41
<b>TABLA 8.1.2.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA UN NÚMERO MÁXIMO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 1000 DEL PROBLEMA 1.	41
<b>TABLA 8.2.1.</b> RESULTADOS OBTENIDOS PARA 12 ITERACIONES DEL PROBLEMA 2.	41
<b>TABLA 8.2.2.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA UN NÚMERO MÁXIMO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 200000 DEL PROBLEMA 2.	42
<b>TABLA 8.3.1.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA 18 ITERACIONES DEL PROBLEMA 3.	42
<b>TABLA 8.3.2.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA 1210 ITERACIONES DEL PROBLEMA 3.	42
<b>TABLA 8.3.3.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA UN NÚMERO MÁXIMO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 90000 DEL PROBLEMA 1.	42
<b>TABLA 8.4.1.</b> RESULTADO OBTENIDO PARA UN NÚMERO MÁXIMO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 1000 DEL PROBLEMA 3.	43

## NOMENCLATURA

$\eta$	Función modelo a utilizar para el ajuste de parámetros, que será función de las variables independientes ( $\underline{X}$ ), y de los parámetros ( $\underline{\beta}$ ).
$m$	Número de parámetros del modelo, utilizado también como número de incógnitas.
$n$	Número de puntos u observaciones experimentales, también es utilizado como número de ecuaciones, ya que estas estarán directamente relacionadas con el número de puntos experimentales.
$l$	Número de variables independientes en el modelo.
$r$	Número de respuestas o variables dependientes del modelo.
$\underline{D}$	Matriz de duplicados de las respuestas experimentales o variables dependientes, cuyos elementos serán denominados $d_{j,z}$ , donde $j = 1, 2, \dots, n$ y $z = 1, 2, \dots, r$ .
$p$	Número de exploraciones realizada a la función objetivo.
$\underline{\beta}$	Vector de los parámetros o incógnitas del modelo, cuyos elementos serán denominados $\beta_i$ , donde $i = 1, 2, \dots, m$ .
$\underline{\eta}$	Matriz de los modelos, cuyos elementos serán denominados $\eta_{j,z}$ , donde $j = 1, 2, \dots, n$ , $z = 1, 2, \dots, r$ . Cada elemento de $\underline{\eta}$ , será expresado en términos de $x_{j,k}$ , y $\underline{\beta}$ , donde $k = 1, 2, \dots, l$ .
$\underline{X}$	Matriz de variables independientes experimentales, cuyos elementos serán denominados $x_{j,k}$ , donde $j = 1, 2, \dots, n$ y $k = 1, 2, \dots, l$ .
$\underline{Y}$	Matriz tridimensional de variables dependientes experimentales, cuyos elementos serán denominados $y_{j,z,h}$ , donde $j = 1, 2, \dots, n$ , $z = 1, 2, \dots, r$ y $h = 1, 2, \dots, d_{j,z}$ . Para los efectos de operación matricial solo serán considerados sus dos primeras dimensiones, ya que la última influirá únicamente en la duplicación del elemento $y_{j,z}$ .
$\underline{F}$	Matriz de los modelos en su forma implícita, cuyos elementos serán denominados $f_{j,z}$ , donde $j = 1, 2, \dots, n$ y $z = 1, 2, \dots, r$ . Cada elemento de $\underline{F}$ , será expresado en términos de $x_{j,k}$ , $\underline{\beta}$ y $y_{j,z}$ , donde $k = 1, 2, \dots, l$ .
$\underline{\delta}$	Matriz de errores asociadas a la matriz de los modelos, cuyos elementos serán denominados $\delta_{j,z}$ , donde $j = 1, 2, \dots, n$ y $z = 1, 2, \dots, r$ . Cada elemento de $\underline{\delta}$ , será expresado en términos de $x_{j,k}$ , $\underline{\beta}$ y $y_{j,z}$ , donde $k = 1, 2, \dots, l$ .
$\underline{\beta} \min$	Vector de los límites inferiores de los parámetros o incógnitas del modelo, cuyos elementos serán denominados $\underline{\beta} \min_i$ , donde $i = 1, 2, \dots, m$ .
$\underline{\beta} \max$	Vector de los límites superiores de los parámetros o incógnitas del modelo, cuyos elementos serán denominados $\underline{\beta} \max_i$ , donde $i = 1, 2, \dots, m$ .
$\phi$	Función objetivo.
$\underline{B}$	Vector de estimación de los parámetros, cuyos elementos serán denominados $b_i$ , donde $i = 1, 2, \dots, m$ .
$\underline{\Delta B}$	Vector de incremento (también denominado paso de la dirección de búsqueda) para el vector de estimación de los parámetros, cuyos elementos serán denominados $\Delta b_i$ , donde $i = 1, 2, \dots, m$ .

$\Delta\beta$  Vector de errores asociados a los parámetros, cuyos elementos serán denominados  $\Delta\beta_i$ , donde  $i = 1, 2, \dots, m$ .

# **1. OBJETIVOS**

## **1.1. OBJETIVO PRINCIPAL**

El objetivo principal de este trabajo de grado es desarrollar un programa modular, y en un lenguaje actualizado, para el ajuste de datos experimentales con modelos de diversas complejidades.

## **1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- Implementar el método de búsqueda directa desarrollado por Hooke y Jeeves.
- Implementar el método de simplex flexible.
- Implementar el método de optimización de Gauss Newton.
- Implementar el método de máxima pendiente.
- Implementar el método de Levenberg Marquardt.
- Implementar el método de búsqueda directa desarrollado por Buzzi Ferraris.
- Desarrollar modelos apropiados para comparar las técnicas implementadas y que permitan al usuario desarrollar una idea previa sobre cual usar en su caso.

Finalmente, además del paquete desarrollado, se redactarán ejemplares de trabajo de grado que las normas establecen y el manual de uso detallado con demostraciones de aplicación y una detallada descripción de los protocolos de comunicación desarrollados.

## 2. METODOLOGÍA UTILIZADA

La manera en que se logró alcanzar los objetivos del presente trabajo se concreta en los siguientes puntos:

- El programa fue desarrollado en una computadora con procesador Intel Pentium III, con una velocidad 747 MHz, una tarjeta Madre Intel D815EEA, con 256 MB de RAM, con un sistema operativo Windows 98 Segunda Edición, pero será probado en Windows 95/NT/Me/2000/XP.
- Se utilizó Microsoft Visual C++ 6.0 (Edición Empresarial) para la construcción de la totalidad del programa ejecutable final, ya que este es un lenguaje de programación moderno y actualizado, que tiene un entorno de desarrollo visual, es un lenguaje orientado a objeto y a eventos, con una alta precisión matemática.
- Se utilizó tanto Microsoft Visual C++ 6.0 (Edición Empresarial) como Digital Visual Fortran 6.0 (Edición Profesional) para la construcción de módulos o funciones externas al programa principal, ya que comparten el mismo entorno de desarrollo y son considerablemente compatibles.
- Para cada técnica se desarrollaron módulos externos (Ej. DLL, controles ActiveX, librerías, etc.) y/o internos (Ej. métodos, funciones, macros, etc.), a fin de simplificar y facilitar la lectura del código fuente, además que, una vez integrados fue factible el uso de dichos módulos en forma compartida, y así minimizar el tamaño de dichos códigos.
- Con la ayuda de la MFC (Microsoft Foundation Class) se desarrollaron módulos gráficos con la finalidad de presentar el avance de la regresión.
- Se desarrollaron ejemplos de aplicación con la finalidad de comprobar la robustez del programa.
- Para cada método a estudiar se analizaron sus características, restricciones, universo de aplicación, ventajas y desventajas.

### **3. ACTIVIDADES**

Las actividades que se realizaron para alcanzar los objetivos del presente trabajo de grado se concreta en los siguientes puntos:

- Recopilación de información.
- Familiarización con el entorno integrado de desarrollo de Microsoft Visual C++ 6.0 y Digital Visual Fortran 6.0.
- Programación de los distintos métodos de optimización:
  - Creación de módulos de entrada y de salida.
  - Implementación cada uno de los métodos y convertirlos luego en librerías dinámicas (DLL).
  - Comprobación del correcto funcionamiento de los métodos implementados.
  - Documentación del código fuente.
- Comprobación de la compatibilidad del programa con otros sistemas operativos.
- Desarrollo de ejemplos de aplicaciones.



## 4. MARCO TEÓRICO

Una de las aplicaciones utilizadas con cierta frecuencia en la ingeniería química es el ajuste de datos experimentales a una función matemática, a la que se denomina modelo, y que relaciona las variables experimentales que se consideran significativas, por medio de unos coeficientes ajustables o parámetros. Los modelos matemáticos ofrecen el modo más conveniente y compacto de reducir la información experimental, y un medio para la simulación de experiencias hipotéticas a partir de muy pocos datos experimentales. La modelización es justamente el proceso mediante el cual se construye una función o algoritmo, capaz de explicar el comportamiento observado del sistema y de predecir respuestas desconocidas. Una vez establecido el modelo general del sistema en estudio, se estará en condiciones de ajustar los parámetros del mismo a los datos experimentales. Se denominan métodos de regresión al conjunto de técnicas matemáticas que tienen como fin establecer el valor de los parámetros del modelo y el intervalo de confianza de los mismos, así como evaluar la bondad del ajuste conseguido. También el análisis de los resultados se puede utilizar para verificar la teoría subyacente que ha conducido a la expresión matemática final <sup>[a]</sup>.

Los métodos de optimización surgieron en función de la necesidad de mejorar el desempeño de los sistemas que existen usualmente. Estrictamente, optimización significa transformar alguna cosa en perfecta, efectiva o funcionalmente en lo mejor posible. De esta forma, podemos definir optimización como un proceso basado en instrucciones que permiten obtener el mejor resultado de un procedimiento. Científicamente estas instrucciones son frecuentemente expresadas a través de métodos matemáticos que permiten maximizar o minimizar alguna propiedad específica de un sistema en estudio. En diversas circunstancias, esta propiedad a ser optimizada es denominada función objetivo <sup>[b]</sup>.

La optimización puede ser dividida en etapas que se caracterizan por:

- a. Definición de la función objetivo. Pueden haber uno o más criterios a ser observados.
- b. La determinación de los factores que presentan influencias significativas sobre la respuesta que se desea optimizar.
- c. La optimización propiamente dicha, esto quiere decir, buscar la combinación de los valores de los factores seleccionados que resulten en la mejor respuesta (maximización o minimización).

#### 4.1. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

Desde un punto de vista matemático, el problema de la resolución de un sistema de  $n$  ecuaciones y con  $m$  incógnitas, consiste en determinar el vector de incógnitas o parámetros  $\underline{\beta}$ , que satisfaga una serie de ecuaciones del tipo:

$$\underline{Y} = \underline{\eta}(\underline{\beta}) \quad [4.1.1]$$

Esta ecuación puede ser representada de la siguiente manera:

$$\underline{Y} - \underline{\eta}(\underline{\beta}) = \underline{0} \quad [4.1.2]$$

Si decimos que:

$$\underline{F}(\underline{\beta}) = \underline{Y} - \underline{\eta}(\underline{\beta}) \quad [4.1.3]$$

Entonces, la ecuación [4.1.1] quedará representada en su forma implícita como<sup>1</sup>:

$$\underline{F}(\underline{\beta}) = \underline{0} \quad [4.1.4]$$

Aprovechándonos de esta forma de representar el modelo, podríamos jugar un poco con la ecuación [4.1.4], de forma tal de efectuar ciertas operaciones que nos ayuden a definir algún tipo de función objetivo que nos faciliten la búsqueda de dichas incógnitas, como podría ser:

$$\underline{F}^2(\underline{\beta}) = \underline{0}$$

ó

$$\frac{\underline{F}(\underline{\beta})}{100} = \underline{0}$$

por citar algunos ejemplos.

A diferencia del caso lineal, no existe un método que asegure el logro de la solución en un tiempo de cálculo razonable. De hecho, mientras algunos criterios que garantizan la convergencia tienen el inconveniente de ser demasiado lentos, otros que son más rápidos pueden presentar el problema de diverger con gran facilidad <sup>[1]</sup>.

---

<sup>1</sup> Desde el punto de vista matemático debe cumplirse que  $\underline{F}(\underline{\beta})$  sea igual a cero, pero desde el punto de vista experimental  $\underline{F}(\underline{\beta})$  no será necesariamente igual a cero, y en este caso utilizaremos la notación  $\underline{\delta}(\underline{\beta})$ .

También es posible imponer algún tipo de restricción tal que:

$$\beta \min_i \leq \beta_i \leq \beta \max_i \quad [4.1.5]$$

donde  $\beta \min_i$  y  $\beta \max_i$  sean respectivamente los límites inferior y superior de las incógnitas  $\beta_i$ .

Todos los métodos empleados para la resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales proceden de forma secuencial, a través de una serie de pasos sucesivos. Cada uno de los pasos viene generado por el método con sus adecuados artificios. El nuevo punto debe ser en cada ciclo o iteración una mejor aproximación de la solución con respecto a la anterior, reemplazando los valores anteriores por los actuales para proseguir así con la búsqueda.

Suponga que tenemos un conjunto de respuestas experimentales o variables dependiente<sup>2</sup>,  $y_j$ , con  $j = 1, 2, \dots, n$ , donde  $n$  representa el número de puntos experimentales o experiencias, y otro conjunto de variables independientes,  $x_{j,k}$ , con  $j = 1, 2, \dots, n$ , y  $k = 1, 2, \dots, l$ , donde  $l$  representa el número de variables independientes ligadas al modelo. Se establece como  $\beta_i$  con  $i = 1, 2, \dots, m$  los parámetros del modelo <sup>[2]</sup>:

$$\underline{\eta} = \underline{\eta}(\underline{X}, \underline{\beta}) \quad [4.1.6]$$

con  $n > m$ . Puede observarse que para cada uno de los  $\eta_j$  existe un conjunto de  $\underline{X}$  denotado también  $\underline{X}^k = [x_{j,1} \quad x_{j,2} \quad \dots \quad x_{j,l}]$ , relacionado con los valores experimentales de  $y_j$ , para:

$$y_j = \eta_j + \delta_j \quad \text{con } j = 1, 2, \dots, n \quad [4.1.7]$$

en donde  $\delta_j$  representa algún tipo de error apreciable <sup>[2]</sup>.

Existen dos tipos de errores que pueden ser considerados. Uno es el referido al error de medición experimental de las variables dependientes, el otro es el error implicado en lo que se refiere a la forma del modelo matemático. Si tanto el error del modelo, como el de medición están presentes en la parte experimental,  $\underline{\delta}$  representara la combinación de ambos efectos. Asumiremos entonces que  $\underline{\delta}$  será el vector de error, y será representado de forma que involucre un conjunto de valores desconocidos (parámetros). Para las variables dependientes e independientes dadas, las estimaciones de los parámetros pueden ser consideradas como las variables, ya que en realidad lo que se busca es precisamente dicha estimación.

---

<sup>2</sup> Las dimensiones del número de respuestas y número de duplicados de las variables dependientes, serán omitidas en este punto con la finalidad de facilitar la comprensión del mismo.

Cuando la ecuación [4.1.7] es declarada explícitamente como:

$$Y = \eta(\underline{X}, \underline{\beta}) + \delta \quad [4.1.8]$$

Esta ecuación es llamada *ecuación de regresión* <sup>[2]</sup>.

Muchas de las propiedades deseables de la estimación de parámetros utilizando funciones objetivos de mínimos cuadrados (consistente, eficiente, imparcial y de mínima variancia) son independientes de los modelos lineales y de buena aceptación para los modelos no lineales. Así, la función objetivo a usar frecuentemente para la estimación de parámetros será la de mínimos cuadrados.

## 4.2. FUNCIONES OBJETIVO POR MÍNIMOS CUADRADOS

La función objetivo por mínimos cuadrados es la meta del análisis de la regresión o adaptación de curvas para obtener valores de parámetros desconocidos en una ecuación que utiliza los datos experimentales. Sin tener en cuenta si la ecuación es lineal o no, se requiere un criterio para determinar los mejores parámetros. Este requerimiento se satisface normalmente por la función objetivo de mínimos cuadrados <sup>[3]</sup>.

$$\phi = \sum_{j=1}^n w_j \cdot (y_j - \eta_j(\underline{X}, \underline{\beta}))^2 \quad [4.2.1]$$

donde:

$\phi$ : Función objetivo de mínimos cuadrados.

$\eta_j$ : Función modelo a la que se busca ajustar los parámetros de la *j-ésima* observación.

$y_j$ : Valor de la variable dependiente experimental de la *j-ésima* observación.

$w_j$ : Peso estadístico asociado a el valor de la variable dependiente experimental de la *j-ésima* observación.

$n$ : número de puntos experimentales.

La figura 4.2.1 ilustra la interpretación geométrica del método de mínimos cuadrados como aplicación a un modelo no lineal. En la figura 4.2.2, puede apreciarse los vectores frente a los puntos en el espacio de observación a la superficie encorvada, con el sitio de predicción de  $\underline{Y}$  para un conjunto dado de parámetros estimados,  $\tilde{b}_1$  y  $\tilde{b}_2$ . En el espacio de los parámetros los contornos de la función objetivo  $\phi$ , no será elíptica, pero podrá aparecer como se muestra en la parte derecha de la figura 2.2.1 <sup>[2]</sup>.

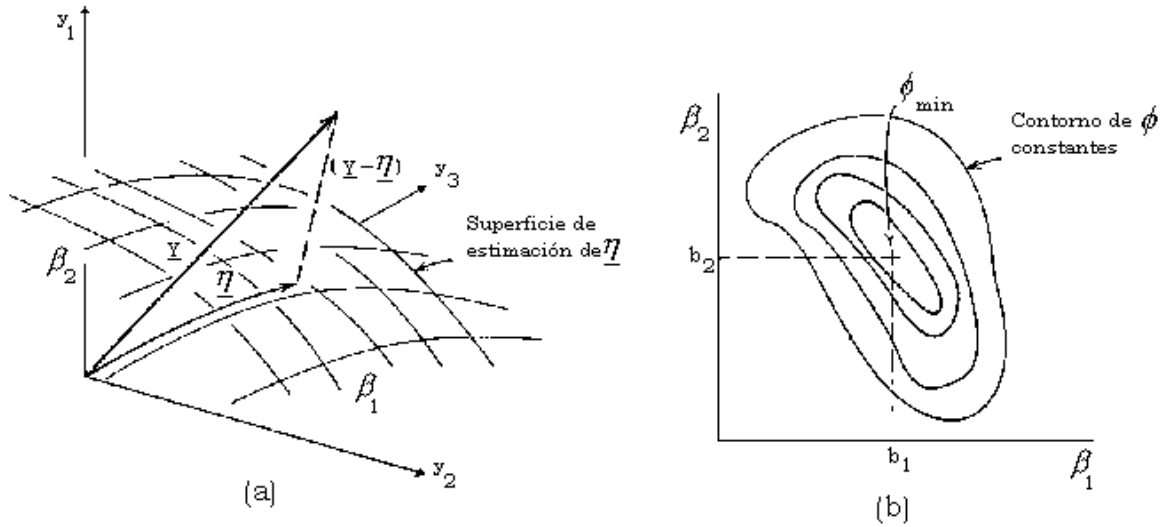


Figura 2.2.1. Interpretación geométrica de mínimos cuadrados para modelos no lineales: (a) espacio de observación (tercera dimensión) y (b) espacio de los parámetros (dos parámetros).

Lo propuesto en la forma de la ecuación [4.1.6], el problema de estimación no lineal aparece como una simple problema de optimización en el espacio de parámetros en el cual los  $y_j$  y  $x_{j,k}$  son valores dados, y los  $\beta_i$  son las variables. Muchos de las herramientas de determinación de optimización no lineal pueden tratarse con éxito en estos problemas.

Cuando se presentan múltiples respuestas debe agregársele a la función objetivo dicha dimensión:

$$\phi = \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r w_{j,z} \cdot (y_{j,z} - \eta_{j,z})^2$$

donde se hará referencia a la observación  $j$ -ésima,  $z$ -ésima en lugar de la observación  $j$ -ésima.

Mientras menor sea el valor de la función objetivo, mejores serán los valores de los parámetros y el modelo.

Los métodos para estimar dichos parámetros o constantes se dividen en dos categorías:

- i. Métodos lineales.
- ii. Métodos no lineales.

Generalmente los métodos no lineales son iterativos, por ejemplo, se escogen valores iniciales o semillas y se comienza a actualizar por un determinado algoritmo y se detiene cuando se cumpla algún criterio de convergencia. Para los modelos lineales, el procedimiento de cálculo es directo por lo que no se requiere un procedimiento iterativo.

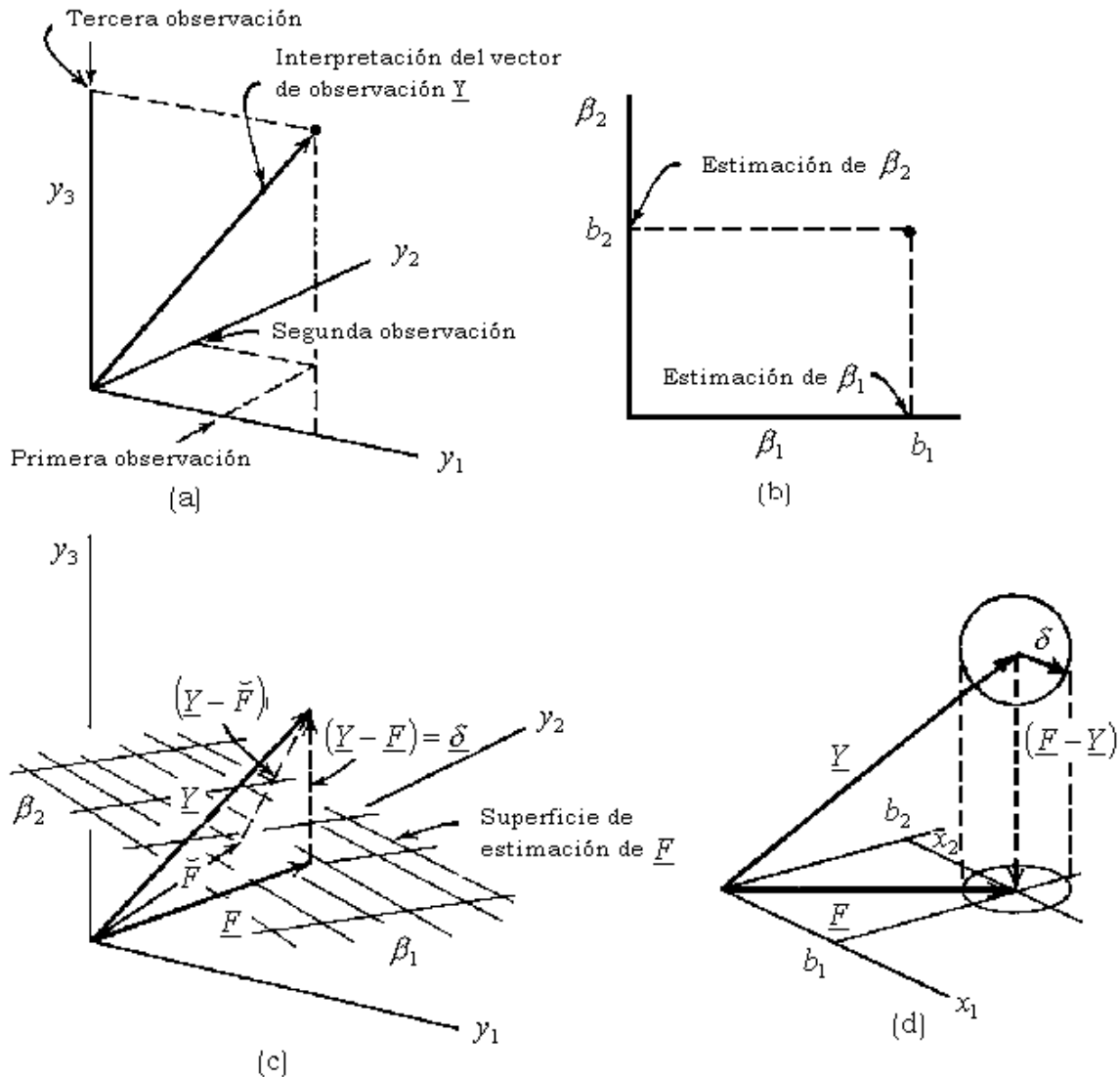


Figura 4.2.2. Interpretación de los vectores de los residuos como normal en la superficie de estimación de  $\underline{F}$ : (a) espacio de observación (tercera dimensión), (b) espacio de los parámetros (dos parámetros), (c) vector normal  $\underline{\delta}$  en vista espacial ( $\underline{F}$  es la mejor estimación del modelo mientras que  $\tilde{\underline{F}}$  es una pobre estimación y (d) espacio de observación experimental (dos variables independientes)

### 4.3. REGRESIÓN PARA SISTEMAS LINEALES Y NO LINEALES

La regresión constituye un caso particular de un tipo de problema más general, donde se buscan los valores de los parámetros que dan lugar a las mejores respuestas, y que se denomina optimización. El término optimización se aplica a aquellos casos en que se maximiza o minimiza la función objetivo, mientras que se reserva el término regresión para aquellos casos en los que la función objetivo mide la bondad del ajuste a una segunda función. En un problema de regresión se requiere siempre la definición matemática de la función a ajustar; en un problema de optimización no es necesario este conocimiento, aunque sí es conveniente para hacer más eficiente la resolución.

Los problemas de optimización, por comodidad, se suelen enfocar sólo hacia búsquedas de mínimos. Cualquier máximo de la función modelo se puede considerar siempre como el opuesto de un mínimo, lo que permite la búsqueda de máximos con los mismos algoritmos que para mínimos: simplemente basta con cambiar el signo de la función objetivo. En los problemas de optimización es frecuente encontrar funciones que contengan varios máximos y mínimos. Se considera óptimo al más favorable de los mínimos relativos (o máximos, si se maximiza la respuesta), de entre todos los encontrados en el espacio de los parámetros. En general, el más favorable suele ser el más profundo de todos los mínimos o el máximo más elevado, aunque en algunas ocasiones hay que tener en cuenta otros factores que consideren la realidad experimental antes de su elección.

#### **4.3.1.REGRESIONES QUE INVOLUCRAN SISTEMAS LINEALES Y NO LINEALES CON UNA ÚNICA RESPUESTA**

Las regresiones que involucran sistemas lineales y no lineales con una única respuesta es el problema típico que se presenta cuando se necesitan estimar los parámetros de un modelo. El mismo se resuelve por el método de mínimos cuadrados que consiste en hallar el mínimo de la función de mérito o función objetivo:

$$\phi = \sum_{j=1}^n w_j \cdot (y_j - \eta_j)^2 \quad [4.3.1.1]$$

donde  $w_j$  es el peso estadístico asociado al la  $j$ -ésima observación,  $y_j$  la respuesta experimental de la  $j$ -ésima observación y  $\eta_j$  es la  $j$ -ésima respuesta predicha por el modelo en función de los parámetros  $\underline{\beta}$  y de la matriz de variables independientes  $\underline{X}^{[2]}$ .

En el caso de que existan duplicados<sup>3</sup>, la ecuación [4.3.1.1] se modificará de la siguiente manera:

$$\phi = \sum_{j=1}^n \sum_{h=1}^d w_j \cdot (y_{j,h} - \eta_j)^2 \quad [4.3.1.2]$$

#### **4.3.2.REGRESIONES QUE INVOLUCRAN SISTEMAS LINEALES Y NO LINEALES CON RESPUESTAS MÚLTIPLES**

En el caso de regresiones que involucran sistemas lineales y no lineales con múltiples respuestas, la estimación de los parámetros del sistema puede hacerse mediante una función objetivo de máxima probabilidad o por una de mínimos cuadrados. La primera

---

<sup>3</sup> Se entiende por duplicados experiencias independientes realizadas con valores idénticos de las variables dependientes.

consiste en encontrar el mínimo mediante la elección de valores apropiados para el vector de parámetros o variables de optimización  $\underline{\beta}$ , y dicha función tiene la siguiente forma:

$$\phi = \sum_{z=1}^r \sum_{a=1}^r p_{z,a} \cdot \sum_{j=1}^n (y_{j,z} - \eta_{j,z}) \cdot (y_{j,a} - \eta_{j,a}) \quad [4.3.2.1]$$

donde  $r$  es el número de respuestas del sistema y  $p_{z,a}$  son los elementos de la matriz  $\underline{P}$  definida como:

$$\underline{P} = \underline{\Gamma}^{-1} \quad [4.3.2.2]$$

donde:

$$\underline{\Gamma} = \begin{bmatrix} \sigma_{1,1} & \sigma_{1,2} & \cdots & \sigma_{1,r} \\ \sigma_{2,1} & \sigma_{2,2} & \cdots & \sigma_{2,r} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \sigma_{r,1} & \sigma_{r,2} & \cdots & \sigma_{r,r} \end{bmatrix} \quad [4.3.2.3]$$

Los elementos  $\sigma_{z,a}$  son estimados por repetición de experimentos con la ecuación:

$$s_{z,a}^2 = \sigma_{z,a} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{h=1}^{d_j} (y_{j,z,h} - \eta_{j,z}) \cdot (y_{j,a,h} - \eta_{j,a})}{\sum_{j=1}^n (d_j \cdot j - n)} \quad [4.3.2.4]$$

Mediante el uso de una función objetivo de mínimos cuadrados, el problema consiste en encontrar el conjunto de valores para los elementos del vector de parámetros del modelo, que haga mínima la siguiente función:

$$\phi = \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r w_{j,z} \cdot (y_{j,z} - \eta_{j,z})^2 \quad [4.3.2.5]$$

En el caso de que existan duplicados, la ecuación [4.3.2.5] se modificará de la siguiente manera:

$$\phi = \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r w_{j,z} \cdot \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (y_{j,z,h} - \eta_{j,z})^2 \quad [4.3.2.6]$$



Con respecto a los factores de peso  $w_{j,z}$  que aparecen en esta ecuación, como a los  $w_j$  que se citaron para el caso de respuestas únicas, se plantean a continuación cuatro maneras de establecer dichos factores:

- a. Considerarlos constantes e iguales a la unidad:

$$w_{j,z} = 1 \quad [4.3.2.7]$$

- b. Considerarlos constantes y dados por la ecuación:

$$w_{j,z} = \frac{1}{\sum_{a=1}^n (y_{a,z} - y_{j,z})^2} \quad [4.3.2.8]$$

- c. Suponerlos inversamente proporcionales al valor experimental de las variables dependientes:

$$w_{j,z} = \frac{1}{Y_{j,z}} \quad [4.3.2.9]$$

- d. Calcularlos usando los elementos diagonales del estimador de los errores experimentales citados anteriormente:

$$w_{j,z} = \frac{1}{\sigma_{j,j}} = \frac{1}{s_{j,j}^2} \quad [4.3.2.10]$$

#### 4.4. CRITERIOS COMÚNMENTE UTILIZADOS EN PROBLEMAS DE OPTIMIZACIÓN

- i. Los métodos de optimización se caracterizan por considerar en sus algoritmos uno o más de los siguientes criterios:
  - Punto inicial de búsqueda.
  - Dirección de búsqueda.
  - Paso de búsqueda.
- ii. Otro factor que diferencia los distintos métodos, se refiere a la necesidad de la previsión de un nuevo punto, que consiste en la utilización de derivadas del modelo matemático  $\eta$  con respecto a las variables independientes ligadas al modelo y los parámetros  $\beta$  a optimizar.

La mayor parte de los problemas que son normalmente comunes en la práctica operacional radica en el exceso de cálculo analítico de las derivadas. En estos casos, los errores de cálculo de las derivadas pueden invalidar el método<sup>[1]</sup>.

Muchos métodos han superado este inconveniente calculando las derivadas en forma numérica, aproximándola a relaciones incrementales<sup>[1]</sup>.

Será entonces:

$$\frac{\partial \eta_j}{\partial \beta_i} = [\eta_j(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_i + \Delta\beta_i, \dots, \beta_m) - \eta_j(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_i, \dots, \beta_m)] / \Delta\beta_i \quad [4.4.1]$$

El incremento de  $\Delta\beta_i$  no es fácil de precisar, por lo que se hace necesario instrumentos de cálculo numérico que imponga el valor de  $\Delta\beta_i$  que modifiquen al modelo  $\eta_j$  en buena medida, dentro de un buen intervalo de precisión de cálculo.

El cálculo numérico en cualquier punto de la derivada, necesita al menos  $2m$  cálculos de la función alrededor del mismo<sup>[1]</sup>.

- iii. Es muy ventajoso la distinción que hacen los métodos que operan directamente sobre el sistema de resolución y transforman el problema de búsqueda en una función objetivo<sup>[1]</sup>.

Una función objetivo utilizada con mucha frecuencia es la función objetivo de mínimos cuadrados citada anteriormente.

- iv. Una última distinción es la aceptación de los puntos previsto por el método<sup>[1]</sup>.

Las alternativas posibles son las siguientes<sup>[1]</sup>:

- a. El punto inicial previsto por los algoritmos (evidentemente se trata de un método que prevé paso y dirección) es escogido de forma arbitraria, y desde allí comienza la búsqueda iterativa<sup>4</sup>.
- b. Los puntos previstos por los algoritmos es aceptado solo si resulta mejor que el anterior con respecto a una función objetivo asignada.

Si el punto escogido se aleja de la solución por la naturaleza de la búsqueda, entonces, el algoritmo actual debe sugerir otros posibles puntos de búsqueda.

---

<sup>4</sup> Para muchos modelos, este criterio no sirve de nada, ya que si no se tiene un punto de partida cercana a la solución, la solución podría converger en algún máximo o mínimo local que no represente una solución lógica al problema real.

- c. Los puntos previstos por el método, vienen aceptado solo si resulta mejor que el anterior, y pueda observarse una mejora en la función objetivo y/o una variación en las coordenadas de la dirección de búsqueda resulta aceptable con respecto a ciertas especificaciones prefijadas.

#### 4.5. PRINCIPALES MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN

El problema de resolución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales puede ser transformado en un problema de búsqueda de mínimos de una función objetivo, generalmente <sup>[1]</sup>:

$$\phi = \sum_{j=1}^n w_j \cdot (y_j - \eta_j(\underline{X}, \underline{\beta}))^2$$

Cualquier método general de optimización puede ser utilizado para la búsqueda de la solución del problema <sup>[1]</sup>.

En las secciones subsecuentes se expondrán los métodos comúnmente utilizados.

##### 4.5.1.MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA (HOOKE Y JEEVES)

El método de búsqueda directa propuesto por Hooke y Jeeves tiene algunas ventajas en la estimación de parámetros de modelos no lineales. No requiere de cálculos de derivadas y es capaz de acelerar el paso de búsqueda. La desventaja de este método radica en que es muy lento en comparación con los métodos derivativos o los otros métodos de búsqueda directa, especialmente cuando el número de parámetros es muy elevado.

El algoritmo de búsqueda directa opera de la siguiente manera:

- Los valores iniciales  $\underline{b}$ , para todos los  $\underline{\beta}$  deben proporcionarse, como cambios incrementales iniciales para cada uno de los parámetros  $\Delta b_i$ .
- La función objetivo  $\phi$  es evaluada primero en los puntos iniciales  $\underline{b}$ .
- Para cada uno de los  $b_i$  del conjunto de  $\underline{b}$  se incrementa en  $+\Delta b_i$ .
- Sí la función objetivo  $\phi$  es mejorada,  $b_i + \Delta b_i$  es adoptada como la nueva estimación de  $\beta_i$ , y el valor anterior de  $b_i$  será reemplazado con el nuevo valor  $b_i + \Delta b_i$ .
- Sí la función objetivo  $\phi$  no es mejorada, se procede a probar entonces con  $b_i - \Delta b_i$ .
- Sí la función  $\phi$  no es mejorada con cada uno de los  $\pm \Delta b_i$ , entonces no existirá cambio alguno en el valor actual de  $b_i$ .
- El proceso se repetirá para todos los  $\beta_i$  hasta completar el movimiento exploratorio.
- La nueva estimación de parámetros define un vector en un espacio de parámetros que representa una dirección exitosa para reducir la función objetivo  $\phi$ .

- Una serie de pasos acelerados o movimientos de modelo son hecho a lo largo de este vector con tal de que la función  $\phi$  sea reducida.
- La magnitud del movimiento del modelo en cada una de las direcciones de coordenadas será proporcional al número de los anteriores movimientos exitosos en la dirección deseada.
- Sí la función  $\phi$  no es mejorada por uno de estos movimientos del modelo, un nuevo movimiento exploratorio debe realizarse con el fin de definir una nueva dirección de búsqueda satisfactoria.
- Sí el movimiento exploratorio falla dada una dirección de búsqueda, los valores de  $\Delta b_i$  serán reducidos gradualmente hasta que cada una de las nuevas direcciones sean satisfactorias o hasta cada  $\Delta b_i$  se reduzca hasta una cierta tolerancia.

Es muy fácil de agregar simples restricciones en las rutinas de búsquedas. Por ejemplo, sí se desea restringir los  $b_i$  a solo valores positivos, como es requerido en ciertas categorías de los problemas de ingeniería cuando los  $b_i$  representan cantidades físicas que no pueden ser negativas, se puede incluir la restricción:

$$b \min_i \leq b_i \leq b \max_i$$

donde:

$b \min_i$ : límite inferior de la búsqueda para  $b_i$ .

$b \max_i$ : límite superior de la búsqueda para  $b_i$ .

#### 4.5.2.SIMPLEX FLEXIBLE

El método de simplex se aplicaba inicialmente a sistemas lineales. Debido a su gran efectividad y flexibilidad, se han realizado variaciones a sus técnicas iniciales para poder ser aplicados a modelos no lineales.

Es un método de minimización de una función objetivo no lineal que no requiere derivadas. Es un modelo regular de búsqueda. Esta técnica ha demostrado ser muy exitosa, y es especialmente efectiva cuando el número de parámetros del modelo se incrementa. Para dos parámetros, el método de simplex es un triángulo equilátero (tres puntos), para tres parámetros, el planteamiento será el de un tetraedro regular (cuatro puntos). Ver figura 4.5.2.1.

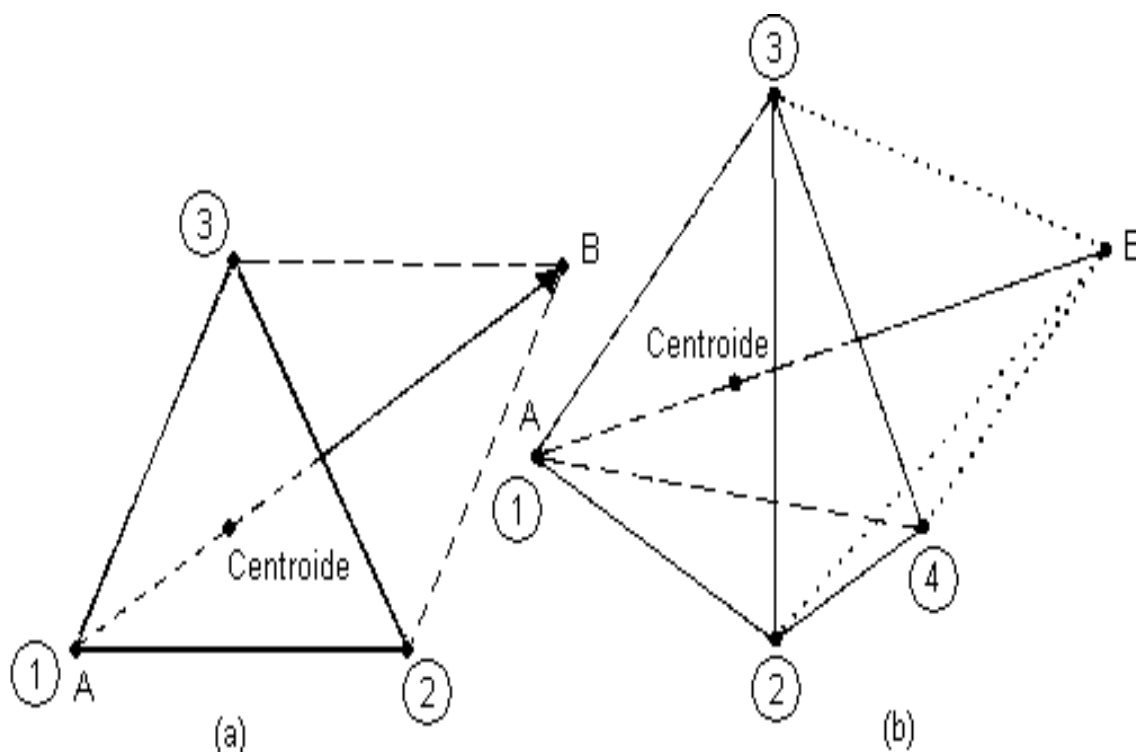


Figura 4.5.2.1. Simplex regular para dos y tres parámetros independientes. Los extremos (1) representan las alteraciones más bajas. Los puntos de flecha señalan la dirección de mejora. (a) Simplex con dos variables. (b) Simplex con tres variables.

En la búsqueda para una minimización de una función objetivo de mínimos cuadrados,  $\phi$ , los valores de ensayo de los parámetros modelos puede hacerse seleccionando los puntos en el espacio de parámetros localizado en los vértices del simplex, como originalmente fue sugerido por Spendley, Hext y Himsworth en conexión con los propósitos experimentales. La función objetivo es evaluada en cada uno de los vértices del simplex. Una proyección es realizada en el punto que presenta los valores más altos de la función objetivo, el punto A de la figura 4.5.2.1, a través del centro del simplex. El punto A es eliminado y un nuevo simplex termina el cálculo, y se forma, compuesto de los puntos restantes anteriores y el nuevo punto, B, localizado a lo largo de la línea proyectada a una distancia apropiada del centro. La continuación de este procedimiento, consiste en siempre anular el vértice que alcanza el valor más alto de la función objetivo, las reglas para reducir el tamaño del simplex y las reglas para prevenir la exploración en la vecindad de los extremos, permite una búsqueda libre de derivadas en la cual el tamaño del paso, es en esencia, la mejora a los niveles consecutivamente reducidos. La figura 4.5.2.2 ilustra las sucesivas formas del simplex para un modelo con dos parámetros con un buen comportamiento para una función objetivo de mínimos cuadrados.

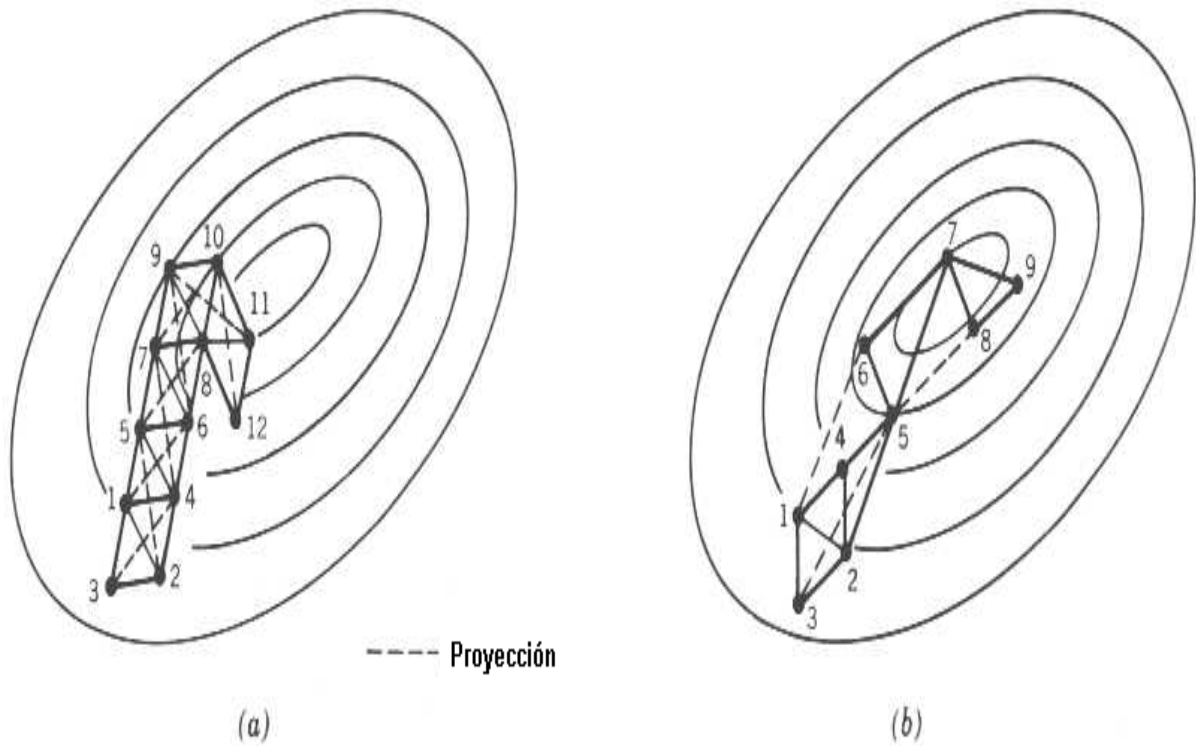


Figura 4.5.2.2. Secuencias de simplex obteniendo una minimización de una función objetivo de mínimos cuadrados: (a) Simplex regular, (b) Simplex de tamaño variable.

Ciertamente existen dificultades prácticas en el procedimiento original, ya que no se modifica la velocidad de búsqueda, y este método falla cuando se presentan valles o superficies encorvadas. Por lo tanto es necesaria una técnica que permita alterar la forma de búsqueda del método de simplex, para que pueda ser más eficaz y de fácil implementación en computadores digitales.

Para simplificar la notación, se mostrará solamente la dependencia funcional de la función objetivo  $\phi$  con los parámetros estimados, ignorando en la notación las variables dependientes e independientes:

$$\phi = \phi(b) \quad b = [b_1, b_2, \dots, b_m] \quad [4.5.2.1]$$

Utilizaremos la notación  $b_i = [b_{1,i}, b_{2,i}, \dots, b_{m,i}]$ , como el vector que especifica el vértice  $i$  del simplex. Habrá  $m+1$  vértices comprendiendo el simplex, y en cada uno estará especificado por un vector  $b_i$ . También denotaremos  $\phi_i$ , como los valores de las funciones objetivos. El simplex inicial será un simplex regular (no tiene que ser así necesariamente) con el vértice 1 como el original. De los textos de geometría analítica, se puede conocer que las coordenadas de los vértices del simplex regular son designadas como se muestra en la tabla 4.5.2.1.

**Tabla 4.5.2.1. Coordenadas iniciales de los vértices del simplex.**

Vértices	Coordenadas				
	$b_{1,i}$	$b_{2,i}$	...	$b_{m-1,i}$	$b_{m,i}$
1	0	0	...	0	0
2	$\pi_1$	$\pi$	...	$\pi$	$\pi$
3	$\pi$	$\pi_1$	...	$\pi$	$\pi$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	...	$\vdots$	$\vdots$
$m$	$\pi$	$\pi$	...	$\pi_1$	$\pi$
$M+1$	$\pi$	$\pi$	...	$\pi$	$\pi_1$
<p>Donde:</p> $\pi_1 = \frac{a}{m \cdot \sqrt{2}} \cdot (\sqrt{m+1} + m - 1)$ $\pi = \frac{a}{m \cdot \sqrt{2}} \cdot (\sqrt{m+1} - 1)$ <p><math>a</math>: es la distancia entre dos vértices</p>					

Por ejemplo para  $m = 2$  y  $a = 1$ , el triangulo dado en la figura 4.5.2.1 tiene las siguientes coordenadas para tres vértices:

Vértices	$b_{1,i}$	$b_{2,i}$
1	0	0
2	0.965	0.259
3	0.259	0.965

Utilizaremos también la siguiente notación:

$$\phi_u = \max_i \{\phi_i\} \text{ con su correspondiente } b_{i=u}$$

$$\phi_l = \min_i \{\phi_i\} \text{ con su correspondiente } b_{i=l}$$

Definiremos un punto  $c$  que será el centro de todos los puntos o vértices del simplex con  $i \neq u$ , es decir, omitiendo el peor punto. El procedimiento consiste en reemplazar de forma secuencial el peor punto o vértice  $b_u$  con un nuevo vértice según el siguiente esquema:

1. Primero, el cálculo del simplex es llevado a cabo por la designación de un vértice  $b^*$  con las coordenadas dadas por:

$$b^* = (1 + \gamma_r) \cdot c - \gamma_r \cdot b_u \quad [4.5.2.2]$$

donde  $\gamma_r$  es el llamado coeficiente de cálculo o proyección, una constante positiva determinada por el usuario que podría ser la unidad. Denotaremos  $\phi(b^*) = \phi^*$ . Después de que  $b_u$  es proyectado, uno de estos tres resultados puede existir:

- a. Si  $\phi_l < \phi^* < \phi_u$ , se reemplaza  $b_u$  por  $b^*$ . El resultado de simplex es usado como un nuevo comienzo de simplex en el paso 1.
- b. Si  $\phi^* < \phi_u$ , extendiendo  $b^*$  a  $b^{**}$  por la relación:

$$b^{**} = \gamma_e \cdot b^* + (1 - \gamma_e) \cdot c \quad [4.5.2.3]$$

donde  $\gamma_e$  es coeficiente de expansión (digamos un valor de 2). Si  $\phi^{**} < \phi_l$ , se reemplaza  $b_u$  por  $b^{**}$  y se regresa de nuevo al paso 1. Si  $\phi^{**} > \phi_l$ , la expansión es fallida, por lo que se reemplaza  $b_u$  por  $b^*$  y se regresa de nuevo al paso 1.

- c. Si  $\phi^* > \phi_l$  para todo  $i \neq u$ , tal que, reemplazando  $b_u$  por  $b^*$ , quede el  $b^*$  como el punto que haga máxima la función objetivo  $\phi$ , que defina un nuevo  $b_u$  que será el valor anterior de  $b_u$  o el  $b^*$ . Después de una reducción se lleva a cabo, denotado por  $b^{**}$ , y es calculado de la siguiente forma:

$$b^{**} = \gamma_c \cdot b_u + (1 - \gamma_c) \cdot c \quad [4.5.2.4]$$

donde  $\gamma_c$  es el coeficiente de reducción,  $0 \leq \gamma_c \leq 1$  (usualmente  $1/2$ ). Reemplazando  $b_u$  por  $b^{**}$  y regresándose de nuevo al paso 1, a menos que el vértice obtenido por la reducción sea mucho peor que el máximo de  $\{\phi(b_u), \phi(b^*)\}$ , esto es,  $\phi^{**} > \min \{\phi_u, \phi^*\}$ , y en este caso reemplace todos los valores de  $b_i$  por  $1/2 \cdot (b_i + b_l)$  y regrese al paso 1.

2. La búsqueda se termina cuando se cumpla la siguiente condición:

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (\phi_i - \bar{\phi})^2}{m}} \leq \varepsilon$$

donde  $\varepsilon$  representa una cierta tolerancia y  $\bar{\phi}$  es el promedio de los valores  $\phi_i$ .

Ciertamente existen dificultades prácticas en el procedimiento original, ya que no se modifica la velocidad de búsqueda, y este método falla cuando se presentan valles o superficies encorvadas. Por lo tanto es necesaria una técnica que permita alterar la forma de búsqueda del método de simplex, para que pueda ser muy eficaz y de fácil implementación en computadores digitales. En general es recomendado como favorable, que previamente se describa un método de búsqueda directa, ya que toma menos tiempo de cómputo, aunque la terminación de la convergencia se alcance lentamente.



### 4.5.3. MÉTODO DE GAUSS NEWTON

La filosofía base de este método consiste en la linearización local de la función modelo  $\eta_j$  en su  $j$ -ésima observación alrededor de varios puntos tentativos, y de la búsqueda iterativa de la solución del sistema mediante sucesivas resoluciones de sistemas lineales de  $m \times m$ , donde  $m$  representaría el número de incógnitas o de parámetros.

Denotaremos  $\underline{B}$  como una aproximación de las incógnitas o parámetros de  $\underline{\beta}$ .

Derivando parcialmente la función objetivo de mínimos cuadrados:

$$\phi = \sum_{j=1}^n (y_j - \eta_j)^2 = \sum_{j=1}^n (\delta_j(\underline{\beta}))^2$$

con respecto a los parámetros, tendremos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial \beta_1} &= 2 \cdot \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_1} = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \beta_2} &= 2 \cdot \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_2} = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial \phi}{\partial \beta_m} &= 2 \cdot \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_m} = 0 \end{aligned} \quad [4.5.3.1]$$

Expandiendo en serie de Taylor y truncándola en el primer termino del desarrollo de las funciones  $\delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})$  y  $\frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_i}$  se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_1} &\cong \sum_{j=1}^n \left[ \delta_j(\underline{B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_1} + \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial^2 \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_1 \cdot \partial \beta_i} \cdot \delta_j(\underline{B}) + \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_1} \cdot \frac{\delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_i} \right) \cdot \Delta b_i \right] \cong 0 \\ \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_2} &\cong \sum_{j=1}^n \left[ \delta_j(\underline{B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_2} + \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial^2 \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_2 \cdot \partial \beta_i} \cdot \delta_j(\underline{B}) + \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_2} \cdot \frac{\delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_i} \right) \cdot \Delta b_i \right] \cong 0 \\ &\vdots \\ \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B} + \underline{\Delta B})}{\partial \beta_m} &\cong \sum_{j=1}^n \left[ \delta_j(\underline{B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_m} + \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial^2 \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_m \cdot \partial \beta_i} \cdot \delta_j(\underline{B}) + \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_m} \cdot \frac{\delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_i} \right) \cdot \Delta b_i \right] \cong 0 \end{aligned} \quad [4.5.3.2]$$

En el método de Gauss Newton se desprecia el término:

$$\frac{\partial^2 \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_m \cdot \partial \beta_i} \cdot \delta_j(\underline{B}) \quad [4.5.3.3]$$

Con tal hipótesis, el sistema [4.5.3.1] transformará en:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_1} \cdot \frac{\delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_i} \right) \cdot \Delta b_i &= - \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_1} \\
\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_2} \cdot \frac{\delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_i} \right) \cdot \Delta b_i &= - \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_2} \\
&\vdots \\
\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_m} \cdot \frac{\delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_i} \right) \cdot \Delta b_i &= - \sum_{j=1}^n \delta_j(\underline{B}) \cdot \frac{\partial \delta_j(\underline{B})}{\partial \beta_m}
\end{aligned} \quad [4.5.3.4]$$

expresado en forma matricial:

$$(\underline{G}^T \cdot \underline{G}) \cdot \underline{\Delta b} = \underline{G}^T \cdot \underline{\delta} \quad [4.5.3.5]$$

Si la matriz  $\underline{G}^T \cdot \underline{G}$  no es singular el sistema [4.5.3.4] se ajusta a una corrección de  $\underline{\Delta B}$  para realizar una nueva aproximación de  $\underline{B}$ .

Por lo que ahora  $\underline{\Delta B}$  será:

$$\underline{\Delta B} = -(\underline{G}^T \cdot \underline{G})^{-1} \cdot \underline{G}^T \cdot \underline{\delta} \quad [4.5.3.6]$$

La secuencia de iteración será la siguiente:

$$b_{j+1} = b_j + \Delta b_j = b_j - \left( (G_j)^T \cdot (G_j) \right)^{-1} \cdot (G_j)^T \cdot \delta_j \quad [4.5.3.7]$$

Como función objetivo se podría utilizar una de mínimos cuadrados como se muestra a continuación:

$$\phi = \sum_{j=1}^n \delta_j^2 = \sum_{j=1}^n (y_j - \eta_j)^2$$

Esta función objetivo, tal y como esta escrita no considera los pesos de las variables dependientes, como tampoco se consideran, no solo en la función objetivo, sino en el planteamiento de este método la presencia de duplicados y la cantidad de respuestas de las variables independientes, la razón de esto fue la necesidad de simplificar un poco la notación y permitir una fácil comprensión del método en sí.

#### 4.5.4.MÉTODO DE MÁXIMA PENDIENTE

El método de máxima pendiente supone como dirección de búsqueda aquella como su nombre lo indica, la máxima pendiente de la función objetivo, y para esto necesita del coseno director proporcional a la primera derivada de esta.

Denotando como  $\underline{B}$  una aproximación al mínimo de la función objetivo  $\phi$ , expresaremos la dirección del gradiente como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
b_1 &= b_1^{ant} - \frac{\partial \phi}{\partial \beta_1} = b_2^{ant} - 2 \cdot \sum_{j=1}^n \frac{\partial \delta_j(\underline{B}^{ant})}{\partial \beta_1} \cdot \delta_j(\underline{B}) \\
b_2 &= b_2^{ant} - \frac{\partial \phi}{\partial \beta_2} = b_2^{ant} - 2 \cdot \sum_{j=1}^n \frac{\partial \delta_j(\underline{B}^{ant})}{\partial \beta_2} \cdot \delta_j(\underline{B}) \\
&\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
b_m &= b_m^{ant} - \frac{\partial \phi}{\partial \beta_m} = b_m^{ant} - 2 \cdot \sum_{j=1}^n \frac{\partial \delta_j(\underline{B}^{ant})}{\partial \beta_m} \cdot \delta_j(\underline{B})
\end{aligned} \tag{4.5.4.1}$$

expresado en forma matricial:

$$B = B^{ant} - 2 \cdot G^T \cdot \delta \quad [4.5.4.2]$$

El procedimiento general es el siguiente:

1. Calcular de manera analítica o numérica el vector  $-\nabla\phi$  y evaluarlo en la primera estimación de parámetros  $B$ .

El vector unitario  $\frac{-\nabla\phi}{\|-\nabla\phi\|}$  es calculado para determinar los componentes de la dirección de búsqueda:

$$\frac{-\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} = \frac{\left[ -\frac{\partial\phi}{\partial\beta_1} \quad -\frac{\partial\phi}{\partial\beta_2} \quad \dots \quad -\frac{\partial\phi}{\partial\beta_m} \right]}{\sqrt{\left(-\frac{\partial\phi}{\partial\beta_1}\right)^2 + \left(-\frac{\partial\phi}{\partial\beta_2}\right)^2 + \dots + \left(-\frac{\partial\phi}{\partial\beta_m}\right)^2}} \quad [4.5.4.3]$$

Por ejemplo para la ecuación lineal:  $z = 2 \cdot \beta_1 - \beta_2$ :

$$\nabla z = \begin{bmatrix} 2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\frac{-\nabla z}{\|-\nabla z\|} = \begin{bmatrix} \frac{-2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}$$

2. El componente de  $\frac{-\nabla \phi}{\|-\nabla \phi\|}$  evaluado en  $\underline{B}$  establece la dirección de búsqueda para el mínimo de la función objetivo  $\phi$  (En el ejemplo anterior, si  $z$  fuese  $\phi$ , los  $\Delta b_i$  iniciales serían:  $\Delta b_1 = \frac{-2}{\sqrt{5}}$  y  $\Delta b_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}$ . Los componentes del gradiente anterior no serán función de  $\underline{B}$ , ya que el ejemplo anterior es lineal en  $\underline{B}$ ). En cada nueva iteración los  $b_i$  serán calculados a partir de sus valores anteriores, por medio de la ecuación:

$$b_i = b_i^{ant} + h_i \cdot \Delta b_i$$

donde:

$h_i$ : representará un valor que acelere o disminuya el paso de búsqueda.

3. La secuencia de movimientos iterativos continua hasta que termine el proceso, es decir, hasta que se observe que la función objetivo  $\phi$  es menor que un determinado criterio. También puede ocurrir que lamentablemente el proceso diverge u oscila y no irá más allá de una mejora significativa en la solución del problema.

El método de máxima pendiente es muy ventajoso en la fase inicial de búsqueda, ya que es poco sensible a la calidad de la aproximación inicial, y desde el punto de vista de la rapidez con que mejora la función de mérito, en cuanto peor sea el punto seleccionado, tanto mejor será esta. Al inicio de la búsqueda con cálculos relativamente pequeños, el método de máxima pendiente puede aportar resultados notables. En lo que concierne a la solución, parece razonable tal estrategia y conviene luego dirigirse, por ejemplo a un método del tipo Newton.

#### 4.5.5. MÉTODO DE LEVENBERG MARQUARDT

El método propuesto por Levenberg Marquardt es una extensión del método de Gauss Newton, que permite la convergencia con estimaciones iniciales relativamente pobres, para el establecer los parámetros desconocidos. Este método utiliza como función objetivo una de mínimos cuadrados. Este método modifica al método de Gauss Newton expuesto anteriormente, agregando un factor  $\lambda$  como se muestra a continuación:

$$(\underline{G}^T \cdot \underline{G} + \lambda \cdot \underline{I}) \cdot \underline{\Delta b} = \underline{G}^T \cdot \underline{\delta} \quad [4.5.5.1]$$

donde:

$\underline{I}$ : Matriz identidad.

$\lambda$  se agrega a cada término de la diagonal principal de la matriz  $\underline{G}^T \cdot \underline{G}$ . Puede demostrarse que cuando  $\lambda \rightarrow +\infty$ , el método de Marquardt es idéntico al método de máxima pendiente y cuando  $\lambda = 0$ , el método se reduce al de Gauss Newton.

Existen varios criterios para regular el comportamiento de  $\lambda$ , a continuación se expondrán uno de ellos:

Denotaremos  $v$  como una variable real mayor a la unidad,  $w$  como un valor constante muy pequeño ( $w \leq 10^{-10}$ ),  $\lambda_0$  como el primer valor de  $\lambda$  ( $\lambda \leq 10^{-10}$ ) y  $\lambda_{ant}$ , como el valor anterior a  $\lambda$ .

Existirán tres condiciones que gobernarán el valor actual del factor  $\lambda$ :

1. Si  $\phi\left(\frac{\lambda_{ant}}{v}\right) \leq \phi(\lambda)$ , entonces el valor actual de  $\lambda$  será reemplazado por  $\frac{\lambda_{ant}}{v}$ .
2. Si  $\phi\left(\frac{\lambda_{ant}}{v}\right) > \phi(\lambda)$  y  $\phi(\lambda_{ant}) \leq \phi(\lambda)$ , entonces el valor actual de  $\lambda$  será reemplazado por  $\lambda_{ant}$ .
3. Si  $\phi\left(\frac{\lambda_{ant}}{v}\right) > \phi(\lambda)$  y  $\phi(\lambda_{ant}) > \phi(\lambda)$ , entonces el valor actual de  $\lambda$  será reemplazado por  $\lambda_{ant} \cdot v^w$ .

### 4.5.3.MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA (BUZZI FERRARIS)

El método propuesto por Buzzi Ferraris es un técnica de búsqueda directa, muy poderosa y eficaz. Este método puede ser aplicado con cualquier tipo de función objetivo.

Buzzi Ferraris escribió originalmente este método en Fortran 77, cuyo programa es conocido como OPTNOV. Este método, antes de proceder a efectuar la búsqueda, acomoda el punto inicial o de partida aplicando una técnica similar a la empleada por Hooke y Jeeves, hasta encontrar un punto favorable, luego comienza a efectuar la búsqueda a lo largo de los ejes normales correspondientes a los parámetros a optimizar, utilizando una técnica conocida como el método de la sección dorada, esta se basa en la rotación de los ejes normales, con la finalidad de aproximarse a la solución óptima.

El método implementado por Buzzi Ferraris es en muchas ocasiones superior al los demás métodos de búsqueda directa, debido a que su técnica de búsqueda es mucho más

eficiente, y es especialmente recomendado para ser utilizado en problemas de optimización relacionados con cinética de reacciones, en donde los procesos a representar por los modelos matemáticos son extremadamente complejos.

#### 4.6. CONSIDERACIONES FINALES

Los métodos como el de Levenberg Marquardt y máxima pendiente, se basan principalmente en la minimización de una función objetivo. La figura 4.6.1 ilustra la interpretación geométrica del gradiente de la función objetivo en términos de los parámetros  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , las curvas cerradas representan los contornos  $\phi$  constantes, que es de procedimiento de valor creciente frente al mínimo de  $\phi$ .

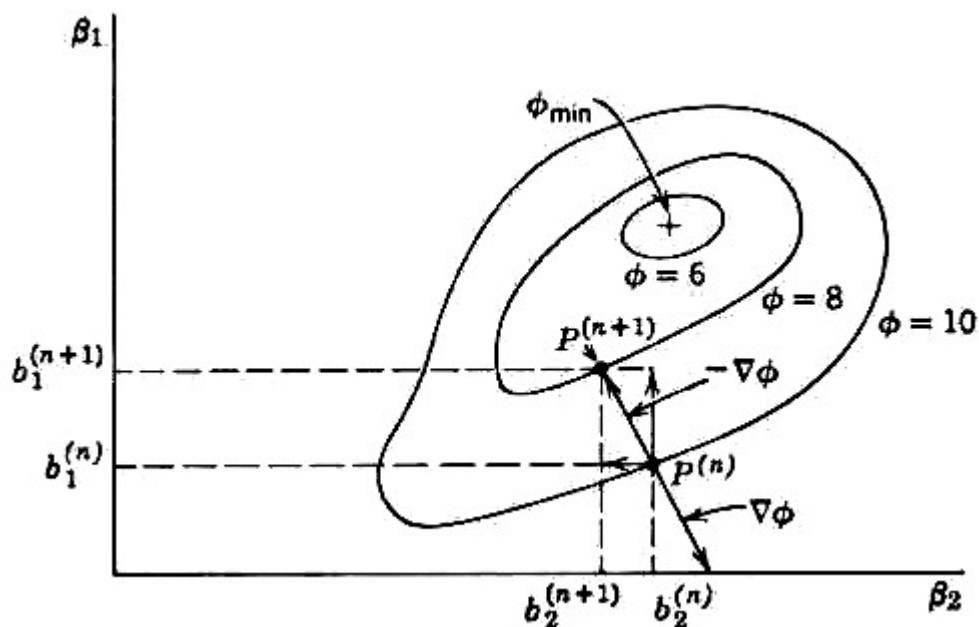


Figura 4.6.1. Representación geométrica de la función objetivo de mínimos cuadrados  $\phi$ ,  $\nabla\phi$  y la dirección de máxima pendiente,  $-\nabla\phi$ , en el espacio de parámetros en el punto  $P$ .

Supondremos que función objetivo  $\phi$  tiene un solo mínimo en la región de búsqueda. Encontrando los componentes del vector  $-\nabla\phi$ , lo cual es posible llevando a cabo una secuencia iterativa de cálculos y reduciendo los valores de la función objetivo  $\phi$  a un menor mínimo local.

Una escala impropia (es decir, lo relativo a las magnitudes de los componentes de  $-\nabla\phi$ ) pueden causar dificultades en la minimización de  $\phi$ . Si la superficie de estudio es muy alargada, como es ilustrado para dos dimensiones en la figura 4.6.2, el método de máxima pendiente puede tomar un excesivo tiempo de convergencia, ya que la dirección demuestra ser casi perpendicular a la dirección que minimizaría a la función objetivo  $\phi$ . El negativo de el gradiente de la función objetivo  $\phi$  apunta en la dirección que la minimiza solamente en

una región local y no en la dirección de su mínimo global, el mínimo deseado, a menos que los contornos sean arcos de ciclos con  $\phi_{\min}$  como un centro.

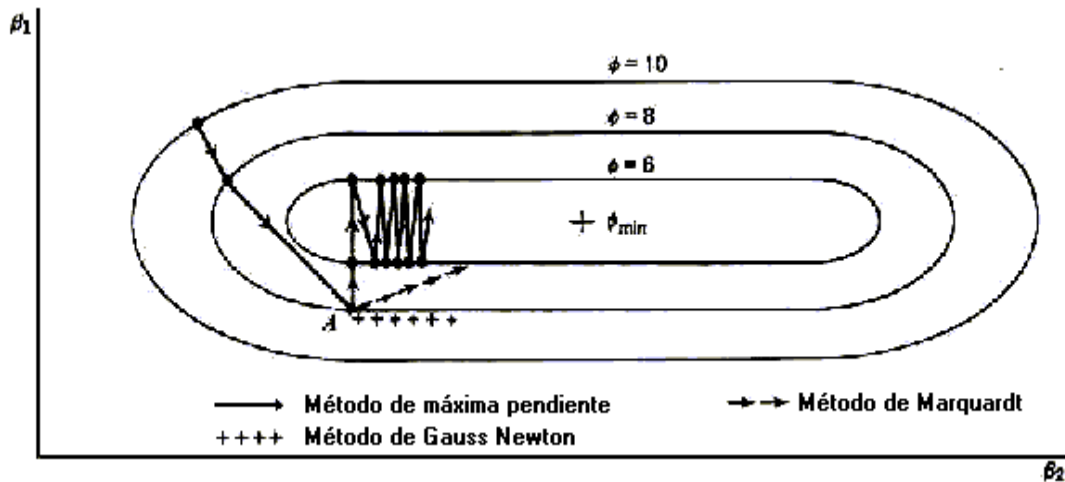


Figura 4.6.2. Una desventaja del método de máxima pendiente.

Marquardt observó en la práctica que para las superficies muy alargadas los métodos de máxima pendiente y de Gauss Newton no convergen con facilidad para ciertas direcciones de búsqueda casi ortogonal a las mismas, por lo que ideó un método que combina a ambos. El método de Levenberg Marquardt mejora las condiciones de la matriz jacobiana.

El método de Levenberg Marquardt ha sido implementado por IBM Share Library Program N° 3094, en marzo de 1964, y ha sido catalogado como realmente efectivo. Es definitivamente superior al método de Gauss Newton y al método de máxima pendiente.

Por otra parte, el método converge, muy a menudo, con una rapidez que es normalmente superior a de los otros métodos.

En lo que se refiere al método de Gauss Newton, es utilizado como un método base para la búsqueda de soluciones de un sistema no lineal (con el número de ecuaciones mayor o igual al número de incógnitas).

El problema fundamental del método de Gauss Newton esta constituido por la estabilidad de la convergencia.

Debe destacarse, que el método de Gauss Newton es parecido al de Newton Raphson, si se demuestra que la matriz jacobiana  $\underline{G}$  no es singular y posiblemente implicaría un largo tiempo en la búsqueda de la dirección.

También, este procedimiento, lamentablemente puede fallar, ya que debido a su naturaleza numérica, el jacobiano  $\underline{G}$  puede hacerse singular.

En el caso en que se adopte una función objetivo con peso, se puede notar una mejora en las características de convergencia cuando se introducen pesos apropiados.

El método de Gauss Newton es extremadamente eficaz cuando se encuentra cercano a las soluciones. Una opción adecuada de la aproximación inicial puede traer una notable velocidad de convergencia.

El método de máxima pendiente es muy ventajoso en la fase inicial de búsqueda, ya que es poco sensible a la calidad de la aproximación inicial, y desde el punto de vista de la rapidez con que mejora la función objetivo, en cuanto peor sea el punto seleccionado, tanto mejor será esta. Al inicio de la búsqueda con cálculos relativamente pequeños, el método de máxima puede aportar resultados notables. En lo que concierne a la solución, parece razonable tal estrategia y conviene luego dirigirse, por ejemplo a un método del tipo Newton.

El método de Levenberg Marquardt es sin duda muy interesante, y es uno de los más utilizados en la práctica. Algunos atenuantes, pueden ponerse con respecto a la necesidad en que en cada iteración se deba resolver muchas veces los sistema de ecuaciones presentes en este método, con diferentes valores de  $\lambda$  y esto evidentemente muestra una desventaja en cuanto al tiempo de cálculo.

El método de búsqueda directa propuesto por Hooke y Jeeves tiene algunas ventajas en la estimación no lineal. No requiere de cálculos de derivadas y es capaz de acelerar el paso de búsqueda. La desventaja de este método radica en que es muy lento en comparación con los métodos derivativos o los otros métodos de búsqueda directa, especialmente cuando el número de parámetros es muy elevado.

El método de simplex es un método de minimización de una función objetivo no lineal que no requiere derivadas, es un modelo regular de búsqueda. Esta técnica ha demostrado ser muy exitosa, y es especialmente efectiva cuando el número de parámetros del modelo se incrementa.

Ciertamente existen dificultades prácticas en el procedimiento original, ya que no se modifica la velocidad de búsqueda, y este método falla cuando se presentan valles o superficies encorvadas. Por lo tanto es necesaria una técnica que permita alterar la forma de búsqueda del método de simplex, para que pueda ser muy eficaz y de fácil implementación en computadores digitales. En general es recomendado como favorable, que previamente se describa un método de búsqueda directa, ya que toma menos tiempo de cómputo, aunque la terminación de la convergencia se alcance lentamente.

El método implementado por Buzzi Ferraris es en muchas ocasiones superior al los demás métodos de búsqueda directa, y es especialmente recomendado para ser utilizado en problemas de optimización relacionados con cinética de reacciones, en donde los procesos a representar por los modelos matemáticos son extremadamente complejos.

Cada uno de los métodos analizados, presentan una peculiaridad destacable y por consiguiente seria oportuna la integración de estos, para así ofrecer un programa de optimización eficiente.



## 5. ESQUEMA DE FUNCIONAMIENTO DEL PROGRAMA

La aplicación implementada en este trabajo de grado fue creado en el ambiente de desarrollo integrado de Microsoft Visual C++ 6.0, pero puede interactuar perfectamente con rutinas creadas desde Fortran 90/95, y enlazadas y compiladas en forma de DLL (dynamic-link library).

El programa, cuyo nombre es OptiMiz, esta dividido principalmente en tres partes. La primera contiene las rutinas de los distintos métodos de optimización a utilizar por la aplicación, empaquetadas en una DLL creada desde C++. La segunda parte es la que contiene las rutinas de el modelo matemático, derivadas analíticas del modelo matemático con respecto a los parámetros y la función objetivo a emplear en forma de DLL (estas pueden ser creadas tanto en C/C++ como en Fortran 90/95), estas deben ser desarrolladas por el usuario. Y por último se encuentra el programa ejecutable, creado en Microsoft Visual C++ 6.0, que es el encargado de integrar las rutinas de las diversas funciones creadas en forma de DLL y evaluarlas con los distintos métodos de optimización creadas en esta primera parte.

El programa en cuestión esta integrado por numerosos archivos, pero entre ellos los más importantes son los siguientes:

- **OptiMiz.exe** Archivo ejecutable que inicia la aplicación.
- **Metodos.dll** Contiene todas las rutinas relacionadas con los diversos métodos de optimización.
- **FunObjC.dll** Contiene la rutina de la función objetivo a emplear por el programa, esta DLL deberá ser creada por el usuario en lenguaje C o C++.
- **FunObjF.dll** Contiene la rutina de la función objetivo a emplear por el programa, esta DLL deberá ser creada por el usuario en lenguaje Fortran 90/95.
- **ModeloC.dll** Contiene la rutina del modelo matemático a emplear por el programa, esta DLL deberá ser creada por el usuario en lenguaje C o C++.
- **ModeloF.dll** Contiene la rutina del modelo matemático a emplear por el programa, esta DLL deberá ser creada por el usuario en lenguaje Fortran 90/95.
- **DervC.dll** Contiene la rutina de las derivadas analíticas del modelo matemático con respecto a los parámetros a emplear por el programa, esta DLL deberá ser creada por el usuario en lenguaje C o C++.
- **DervF.dll** Contiene la rutina de las derivadas analíticas del modelo matemático con respecto a los parámetros a emplear por el programa, esta DLL deberá ser creada por el usuario en lenguaje Fortran 90/95.

La forma de instalación, creación de archivos de funciones y uso de la aplicación se encuentran claramente explicados en el *Manual del Usuario* que se anexa como libro aparte a esta tesis de grado.

La figura 5.1 muestra el esquema general de funcionamiento del programa.

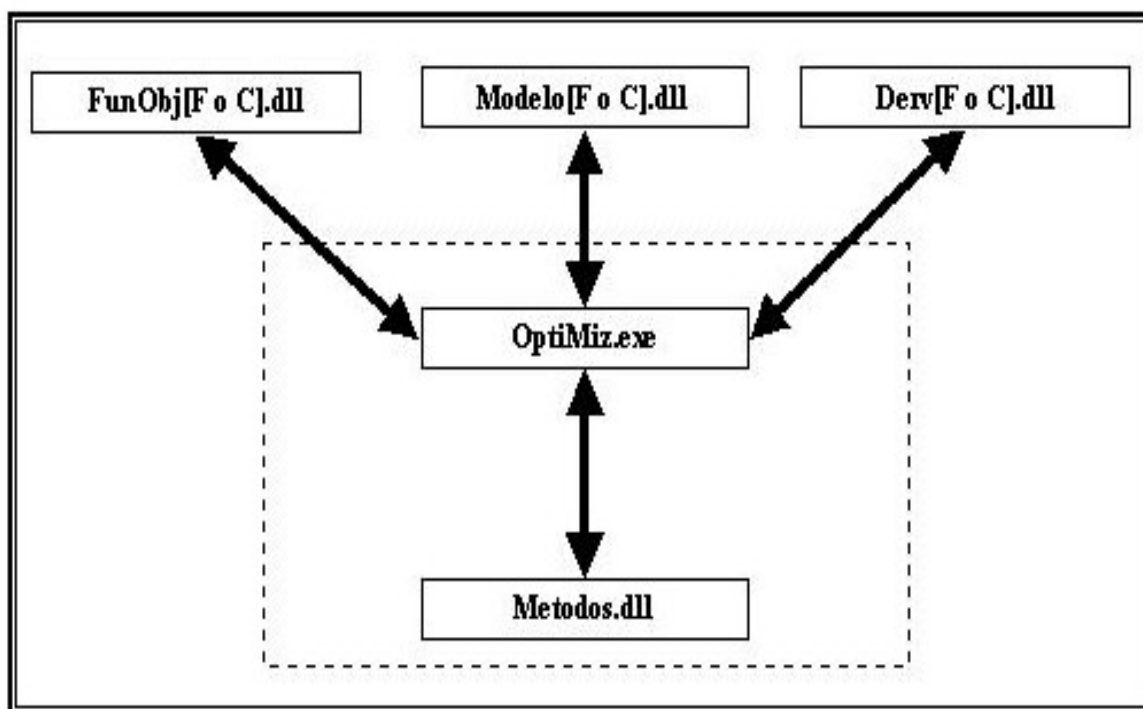


Figura 5.1. Esquema general de funcionamiento de la aplicación.

Desde la aplicación se puede crear y actualizar el archivo de datos experimentales, en el mismo se guarda también toda la información necesaria para la llevar a cabo los procesos de optimización además de permitir almacenar igualmente los resultados obtenidos.

Este tipo de documento solo podrá ser cargado y procesado por la aplicación, sin embargo, la aplicación permite descargar los resultados en archivos tipo texto, cuyos valores se podrán pasar con relativa facilidad a otros formatos, como por ejemplo a archivos de Microsoft Excel o algún otro manejador de hojas de cálculos, en donde podrán analizarse y graficarse los resultados según las preferencias y necesidades del usuario.

Haciendo uso del programa, se pueden resolver muchos problemas de modelado y estimación de parámetros en cinética de reacciones químicas complejas llevadas a cabo en reactores integrales del tipo tubular, tanto de lecho fijo como de lecho fluidizado, y en reactores tanque agitado continuos y discontinuos. Es de esperar que tampoco fracase cuando se aplique a otros tipos de reactores.

Algunas de las particularidades que presenta la aplicación son las siguientes:

1. Funciona con PC que tengan como sistema operativos Microsoft Windows 95/98/Me/NT/2000/XP, y esta diseñado bajo los estándares comunes que hacen que su uso sea de fácil adaptabilidad.
2. Debido a que esta diseñado en un entorno 100 % gráfico, se han desarrollado módulos que son muy útiles para:
  - a. La elección de un punto de partida apropiado para los parámetros a optimizar, lo cual no es siempre una tarea fácil.
  - b. Visualizar el estado de avance del proceso de minimización sin salirse del sistema y con la posibilidad de seguir el proceso a partir del punto en que se suspendió.
  - c. Hacer un análisis visual de residuos, el cual es de mucha ayuda para apreciar si el modelo implementado es apropiado.
3. Permite congelar en forma transitoria la minimización sobre aquellos parámetros que el usuario estime conveniente. Ello contribuye a acelerar considerablemente el avance hacia el mínimo.

Finalmente la aplicación es un programa de fácil modificación debido a su diseño modular, y en un futuro se le podría agregar opciones tales como:

- Implementación de métodos de optimización basados en algoritmos genéticos.
- Implementación de otros métodos de optimización de tipo derivativos como el método de Powell.
- Implementación de módulos que ayuden a estimar los valores iniciales de los parámetros para ciertos tipos de modelos matemáticos.
- Implementación de editores de ecuaciones que eviten las creaciones de sus respectivas DLL.

## 6. RESULTADOS A REPORTAR POR EL PROGRAMA

No basta siempre decir las cosas con firmeza y seguridad, lo más importante es que lo que se diga sea verdad. Por esta razón la aplicación a desarrollar, no solamente reportará los valores de los parámetros optimizados, sino que también reportará otra serie de resultados, sobre todo estadísticos, que nos permitan analizar si los resultados obtenidos son confiables.

### 6.1. ANÁLISIS DE VARIANCIAS.

La aplicación puede reportar dos tipos de variancias, la experimental<sup>5</sup> y la experimental pesada.

#### a. Variancia experimental:

Para la  $z$ -ésima respuesta:

$$V_{\text{exp},z} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (y_{j,z,h} - \bar{y}_{j,z})^2}{\sum_{j=1}^n (d_{j,z} - 1)} \quad [6.1.1]$$

donde:

$V_{\text{exp},z}$ : Variancia experimental para la  $z$ -ésima respuesta.

$n$ : Número de puntos experimentales.

$d_{j,z}$ : Duplicados del  $j$ -ésimo punto experimental de la  $z$ -ésima respuesta.

$y_{j,z,h}$ : Respuesta experimental del  $j$ -ésimo punto experimental de la  $z$ -ésima respuesta del  $h$ -ésimo duplicado.

$\bar{y}_{j,z}$ : Promedio de los duplicados de la respuesta experimental del  $j$ -ésimo punto experimental de la  $z$ -ésima respuesta.

Para todas las respuestas (total):

$$V_{\text{exp}} = \frac{\sum_{z=1}^r V_{\text{exp},z}}{r} \quad [6.1.2]$$

---

<sup>5</sup> Si no existen duplicados, lo cual sucede con frecuencia, el denominador será cero, por lo que no podrá calcularse la varianza experimental, por lo que el programa indicará que no se puede calcular.

donde:

$V_{\text{exp}}$ : Variancia experimental total.

$r$ : Número de respuestas o variables dependientes del modelo.

**b. Variancia experimental pesada:**

Para la  $z$ -ésima respuesta:

$$V_{ep,z} = \frac{\sum_{j=1}^n w_{j,z} \sum_{h=1}^{d_{j,r}} (y_{j,z,h} - \bar{y}_{j,z})^2}{\sum_{j=1}^n (d_{j,z} - 1)} \quad [6.1.3]$$

donde:

$V_{ep,z}$ : Variancia experimental pesada para la  $z$ -ésima respuesta.

$w_{j,z}$ : Factor de peso del  $j$ -ésimo punto experimental de la  $z$ -ésima respuesta.

En caso de que no existan duplicados  $\bar{y}_{j,z}$  tendrá el valor de  $z$ -ésima respuesta experimental.

Para todas las respuestas (total):

$$V_{ep} = \frac{\sum_{z=1}^r V_{ep,z}}{r} \quad [6.1.4]$$

donde:

$V_{ep}$ : Variancia experimental pesada total.

## 6.2. ANÁLISIS DE VARIANCIAS SOBRE LA REGRESIÓN.

Para el análisis de variancias sobre la regresión se reportan dos tipos, la debida a la regresión y la de los residuos.

**a. Variancia debido a la regresión:**

Para la  $z$ -ésima respuesta:

$$V_{reg,z} = \frac{\sum_{j=1}^n w_{j,z} \cdot (\eta_{j,z} - \bar{y}_{j,z})^2}{n - ml} \quad [6.2.1]$$

donde:

$V_{reg,z}$ : Variancia debido a la regresión para la  $z$ -ésima respuesta.

$ml$ : Número de parámetros libres.

Para todas las respuestas (total):

$$V_{reg} = \frac{\sum_{z=1}^r V_{reg,z}}{r} \quad [6.2.2]$$

donde:

$V_{reg}$ : Variancia total debido a la regresión.

#### **b. Variancia de los residuos:**

Para la  $z$ -ésima respuesta:

$$V_{res,z} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (\eta_{j,z} - y_{j,z,h})^2}{\sum_{i=1}^n (d_{j,z} - ml)} \quad [6.2.3]$$

donde:

$V_{res,z}$ : Variancia de los residuos para la  $z$ -ésima respuesta.

Para todas las respuestas (total):

$$V_{res} = \frac{\sum_{z=1}^r V_{res,z}}{r} \quad [6.2.4]$$

donde:

$V_{res}$ : Variancia total de los residuos.

### **6.3. ÍNDICE DE CORRELACIÓN, PENDIENTE Y CORTE CON EL EJE DE LAS ABSCISAS.**

A medida que la función objetivo disminuye, el índice de correlación debe tender a uno igualmente la pendiente que se obtiene al aplicar el método de mínimos cuadrados al conjunto de las respuestas teóricas vs. respuestas experimentales debe tender a uno y su corte con el eje de las abscisas a cero.

**a. Índice de correlación:**

Para la  $z$ -ésima respuesta:

$$R_z^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (y_{j,z,h} - \eta_{j,z})^2}{\sum_{j=1}^n \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (y_{j,z,h} - \bar{y}_z)^2} \quad [6.3.1]$$

donde:

$R_z$ : Índice de correlación de la  $z$ -ésima respuesta.

$\bar{y}_z$ : Promedio de la  $z$ -ésima respuesta experimental.

Para todas las respuestas (total):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (y_{j,z,h} - \eta_{j,z})^2}{\sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r \sum_{h=1}^{d_{j,z}} (y_{j,z,h} - \bar{y})^2} \quad [6.3.2]$$

donde:

$R$ : Índice general de correlación.

$\bar{y}$ : Promedio de todas las respuestas experimentales, incluyendo los duplicados.

**b. Pendiente y corte con el eje de las abscisas:**

Cuando el ajuste de los parámetros es perfecto, los valores de las respuestas teóricas deberán ser exactamente igual a las experimentales, lo cual indica que la gráfica de las respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales generará una recta de pendiente uno y el corte en el eje de las abscisas será igual a cero. Con la finalidad de obtener una idea de que tan bueno es el ajuste, se hace necesario el cálculo de la pendiente y corte con el eje de las abscisas.

Las ecuaciones para el cálculo de la pendiente y el corte con el eje de las abscisas serán respectivamente:

$$m = \frac{S_{xy} - S_x \cdot S_y}{S_{xx} - S_x^2} \quad [6.3.3] \quad b = \frac{S_{xx} \cdot S_y - S_{xy} \cdot S_x}{S_{xx} - S_x^2} \quad [6.3.4]$$

donde:

*m*: Pendiente del conjunto de par coordenado respuestas teóricas vs. respuestas experimentales.

*b*: Corte con el eje de las abscisas del conjunto de par coordenado respuestas teóricas vs. respuestas experimentales.

Los valores de  $S_x$ ,  $S_{xx}$ ,  $S_y$  y  $S_{xy}$  se calcularan por las siguientes ecuaciones respectivamente:

$$S_x = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r \eta_{z,j} \quad [6.3.5] \quad S_{xx} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r \eta_{z,j}^2 \quad [6.3.6]$$

$$S_y = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r y_{z,j} \quad [6.3.7] \quad S_{yy} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r (y_{z,j} - \bar{y}_{z,j})^2 \quad [6.3.8]$$

#### 6.4. RESPUESTAS TEÓRICAS

Las respuestas teóricas son las respuestas que reporta el modelo cuando lo evaluamos con los parámetros obtenidos por el proceso de optimización.



## 7. EJEMPLOS DE APLICACIÓN

Con la finalidad de comprobar la eficiencia y robustez del programa desarrollado en este trabajo de tesis, se propondrán algunos ejemplos de aplicación cuya solución ya se conoce.

### Problema 1:

Este problema es obtenido de la página 183 del libro Process Analysis by Statistical Methods, cuyo autor es David M. Himmelblau (John Wiley & Sons, Inc. New York. 1970)<sup>[2]</sup>.

$$\text{Modelo: } \eta = \beta_1 + \beta_2 \cdot x$$

$$\text{Función objetivo: } \phi = \sum_{j=1}^n (y_j - \eta_j)^2$$

Datos experimentales:

$n$	$y$	$x$
1	112	1.14
2	115	1.37
3	152	1.89
4	199	2.09
5	161	2.45
6	209	2.04
7	237	2.73
8	231	3.04

$n$	$y$	$x$
9	233	3.19
10	259	3.09
11	287	3.05
12	240	3.1
13	281	3.34
14	311	3.75
15	392	4.19
16	357	4.59

Método empleado: Simplex flexible.

Punto de partida de los parámetros:  $b_1 = 1$  y  $b_2 = 1$ .

Solución reportada:  $\beta_1 = 13,506$        $\beta_2 = 79,021$        $\phi = 9616$   
Iteraciones = 85

### Problema 2:

Este problema es obtenido de la página 240 del libro Optimization Techniques with Fortran, cuyos autores son James L. Kuester y Joe H. Mize (McGraw – Hill. New York. 1973)<sup>[3]</sup>.

Modelo:  $\eta = \beta_1 + \beta_2 \cdot e^{\beta_3 \cdot x_1}$

Función objetivo:  $\phi = \sum_{j=1}^n (y_j - \eta_j)^2$

Restricciones:

Límite inferior	Parámetros	Límite superior
-1000	$\beta_1$	1000
-1000	$\beta_2$	1000
-1000	$\beta_3$	1000

Datos experimentales:

$N$	1	2	3	4	5	6
$X$	-5	-3	-1	1	3	5
$Y$	127	151	379	421	460	426

Método empleado: Levenberg Marquardt.

Punto de partida de los parámetros:  $b_1 = 400$ ,  $b_2 = -140$  y  $b_3 = -0,13$ .

Solución reportada:  $\beta_1 = 523,29698$        $\beta_2 = -156,93703$   
 $\beta_3 = -0,19967593$        $\phi = 13390,093$   
Iteraciones = 12

### Problema 3:

Este problema es tomado de la página 184 de la publicación de G. Buzzi Ferraris titulada Metodo automatico per trovare l'ottimo di una funzione, Nota II (Revista de Ingeniería Química. Milán. 1972) <sup>[1]</sup>.

Modelo:  $\eta = 500 \cdot (\beta_1^3 - 4 \cdot \beta_1 - \beta_2)^2 + (\beta_1 - 3)^2$  (función implícita)

Función objetivo:  $\phi = \eta$

Método empleado: Buzzi Ferraris.

Punto de partida de los parámetros:  $b_1 = -3.5$  y  $b_2 = -15$ .

Solución exacta:  $\beta_1 = 3$        $\beta_2 = 15$        $\phi = 0$

Solución reportada:  $\beta_1 = 2,9998$        $\beta_2 = 14,998$        $\phi = 2.58 \times 10^{-8}$   
Iteraciones = 18

#### Problema 4:

Este problema es obtenido de la tesis de postgrado del Ing. Octavio A. Pico S., titulada Deshidrogenación Catalítica Oxidativa de Etilbenceno a Estireno (Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ingeniería, Comisión de Estudios para Graduados, Marzo, 1983) <sup>[5]</sup>.

$$\text{Modelo: } \eta_z = x_z + x_6 \cdot \int_0^{x_7} \left( \sum_{j=1}^{nr} \alpha_{j,z} \cdot R_j \right) dx_7$$

donde:

$z$ : Valor que indica el número de respuestas,  $z = 1, 2, \dots, r$ . ( $r$ : Número de respuestas).

$\eta_z$ : Número de moles predicho por el modelo de la  $z$ -ésima respuesta (Respuestas teóricas).

$x_z$ : Número de moles en la alimentación de la  $z$ -ésima respuesta (Variables independientes).

$x_6$  Flujo volumétrico en la alimentación (Variable independiente).

$x_7$  Tiempo de contacto (Variable independiente).

$nr$ : Número de reacciones.

$\alpha_{j,z}$ : Coeficiente estequiométrico de la  $j$ -ésima reacción de la  $z$ -ésima respuesta.

$R_j$ : Expresión de velocidad para la  $j$ -ésima reacción.

Este modelo esta constituido por nueve reacciones como se muestra en la figura 7.1.

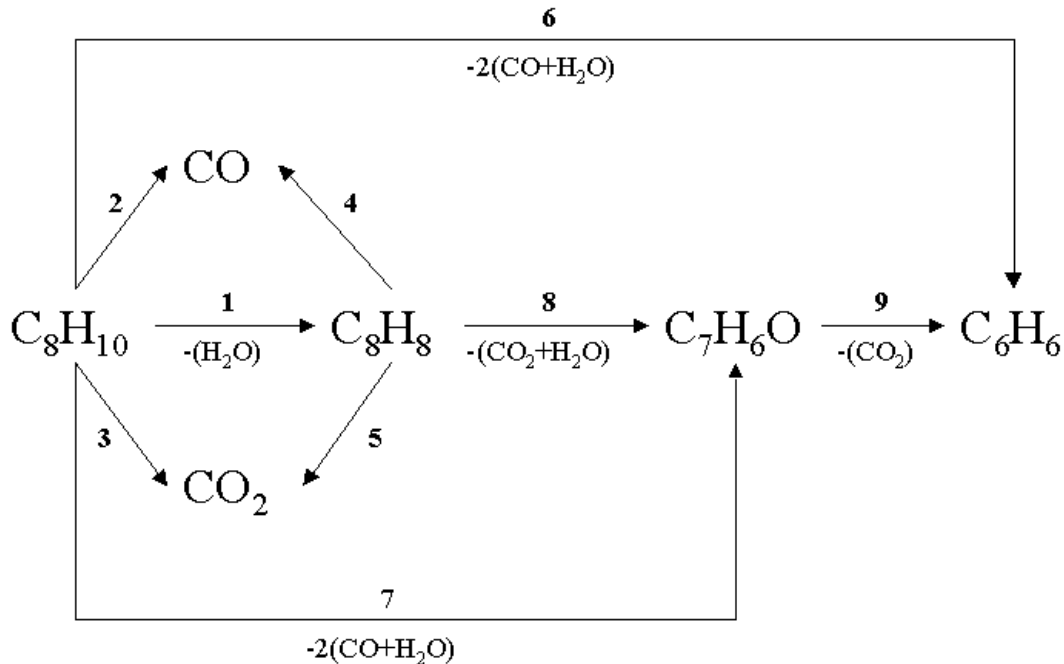


Figura 7.1. Esquema de reacción que dio origen al modelo matemático.

Las velocidades de reacción utilizadas son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 R_1 &= \frac{\beta_1 \cdot P_1}{1 + \beta_{10} \cdot \frac{P_3}{P_2^{1/2}}} & R_2 &= \frac{\beta_2 \cdot P_1^{1/2}}{\left(1 + \beta_{11} \cdot \frac{P_1^{1/2}}{P_2^{1/2}}\right) \cdot (1 + \beta_{14} \cdot P_8^{1/2})} \\
 R_3 &= \frac{\beta_3 \cdot P_1}{\left(1 + \beta_{12} \cdot \frac{P_1}{P_2^{1/2}}\right) \cdot (1 + \beta_{14} \cdot P_8^{1/2})} & R_4 &= \frac{\beta_4 \cdot P_3}{\left(1 + \beta_{13} \cdot \frac{P_3}{P_2}\right) \cdot (1 + \beta_{14} \cdot P_8^{1/2})} \\
 R_5 &= \frac{\beta_5 \cdot P_3}{\left(1 + \beta_{13} \cdot \frac{P_3}{P_2}\right) \cdot (1 + \beta_{14} \cdot P_8^{1/2})} & R_6 &= \beta_6 \cdot P_1 & R_7 &= \frac{\beta_7 \cdot P_1}{1 + \beta_{13} \cdot \frac{P_3}{P_2}} \\
 R_8 &= \frac{\beta_8 \cdot P_3}{\left(1 + \beta_{10} \cdot \frac{P_3}{P_2^{1/2}}\right) \cdot (1 + \beta_{14} \cdot P_8^{1/2})} & R_9 &= \beta_9 \cdot P_4
 \end{aligned}$$

donde:

$\beta_i$ : Son precisamente los parámetros que deben ser ajustados que corresponden a constantes cinéticas.

$P_q$ : Presión parcial de la especie  $q$ -ésima.

El número de respuestas evaluadas en la función objetivo son cinco.

$$\text{Función objetivo: } \phi = \sum_{j=1}^n \sum_{z=1}^r \left( \frac{y_{j,z} - \eta_{j,z}}{y_{j,z}} \right)^2$$

Restricciones:  $0 \leq \beta_i \leq 1000$ .

Método empleado: Buzzi Ferraris.

$$\begin{aligned}
 \text{Punto de partida de los parámetros: } & b_1 = 4,28582 \times 10^{-1} & b_2 &= 4,23500 \times 10^{-2} \\
 & b_3 = 4,43940 \times 10^{-2} & b_4 &= 3,62270 \times 10^{-1} \\
 & b_5 = 2,60045 \times 10^0 & b_6 &= 1,22000 \times 10^{-3} \\
 & b_7 = 3,50000 \times 10^{-2} & b_8 &= 3,07990 \times 10^{-2} \\
 & b_9 = 1,29374 \times 10^{-1} & b_{10} &= 1,25000 \times 10^2 \\
 & b_{11} = 2,75000 \times 10^1 & b_{12} &= 5,10000 \times 10^1 \\
 & b_{13} = 5,50000 \times 10^1 & b_{14} &= 8,80000 \times 10^1
 \end{aligned}$$

Solución reportada:

$\beta_1 = 3.2490474 \times 10^{-1}$	$\beta_2 = 1.5883263 \times 10^{-2}$
$\beta_3 = 4.4394128 \times 10^{-2}$	$\beta_4 = 3.6227173 \times 10^{-1}$
$\beta_5 = 2.6004467 \times 10^0$	$\beta_6 = 1.1795238 \times 10^{-3}$
$\beta_7 = 2.2554189 \times 10^{-2}$	$\beta_8 = 3.0799109 \times 10^{-2}$
$\beta_9 = 1.1761329 \times 10^{-1}$	$\beta_{10} = 1.2416176 \times 10^2$
$\beta_{11} = 3.0605179 \times 10^1$	$\beta_{12} = 4.5555832 \times 10^1$
$\beta_{13} = 5.5863693 \times 10^1$	$\beta_{14} = 8.8327103 \times 10^1$
$\phi = 6.4464607 \times 10^0$	
Iteraciones = 12	

## 8. PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En esta sección se discutirán y se evaluarán los resultados reportados por el programa, y se compararán con los resultados obtenidos en las diversas bibliografías, utilizando estos como referencia.

### 8.1. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 1.

**Tabla 8.1.1. Resultado obtenido para 85 iteraciones del problema 1.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\phi$
Búsqueda directa	1,4594E+01	7,8656E+01	9,618E+03
Simplex flexible	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03
Buzzi Ferraris	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03
Gauss Newton	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03
Máxima pendiente	2,7105E+01	7,4502E+01	9,906E+03
Levenberg Marquardt	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03

**Tabla 8.1.2. Resultado obtenido para un número máximo de iteraciones menor o igual a 1000 del problema 1.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\phi$	Iteraciones
Búsqueda directa	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03	305
Simplex flexible.	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03	80
Buzzi Ferraris	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03	16
Gauss Newton	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03	3
Máxima Pendiente	2,7105E+01	7,4502E+01	9,906E+03	79
Lev. Marquardt	1,3506E+01	7,9021E+01	9,616E+03	12

### 8.2. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 2.

**Tabla 8.2.1. Resultados obtenidos para 12 iteraciones del problema 2.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\phi$
Búsqueda D	5,2000000E+02	-1,9000000E+02	-1,3000000E-01	2,3675891E+04
Simplex F.	4,0043212E+02	-1,3956788E+02	-1,6928400E-01	7,0768670E+04
Buzzi F.	5,2304234E+02	-1,5665721E+02	-1,9992300E-01	1,3390110E+04
Gauss N	4,1640087E+03	-4,4590438E+01	-3,0785007E-01	3,6159436E+04
Máxima P.	4,0002730E+02	-1,3996122E+02	-1,3012400E-01	7,5382569E+04
Lev. Marquardt	5,2330354E+02	-1,5694550E+02	-1,9966700E-01	1,3390093E+04

**Tabla 8.2.2. Resultado obtenido para un número máximo de iteraciones menor o igual a 200000 del problema 2.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\phi$	Iteraciones
Búsqueda D	5,2331810E+02	-1,5696263E+02	-1,9965000E-01	1,3390093E+04	191117
Simplex F.	5,2330554E+02	-1,5694785E+02	-1,9966500E-01	1,3390093E+04	162
Buzzi F.	5,2330501E+02	-1,5694723E+02	-1,9966500E-01	1,3390093E+04	53
Gauss N	No converge				
Máxima P.	No converge				
Lev. Marquardt	5,2330541E+02	-1,5694793E+02	-1,9966400E-01	1,3390093E+04	20

### 8.3. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 3.

**Tabla 8.3.1. Resultado obtenido para 18 iteraciones del problema 3.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\phi$
Búsqueda directa	-35000E+00	-2,8877E+01	4,2252E+01
Simplex flexible	-2,9610E+00	1,4103E+01	3,5619E+01
Buzzi Ferraris	3,0002E+00	1,5004E+01	3,5923E-08
Gauss Newton	No converge		
Máxima pendiente	No converge		
Levenberg Marquardt	-3,2766E+00	-2,1959E+01	4,5796E+01

**Tabla 8.3.2. Resultado obtenido para 1210 iteraciones del problema 3.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\phi$
Búsqueda directa	-3,4993E+00	-2,8852E+01	4,2241E+01
Simplex flexible	3,0000E+00	1,5000E+01	5,1296E-28
Buzzi Ferraris	3,0002E+00	1,5004E+01	3,5923E-08
Gauss Newton	No converge		
Máxima pendiente	No converge		
Levenberg Marquardt	-3,2766E+00	-2,1959E+01	4,5796E+01

**Tabla 8.3.3. Resultado obtenido para un número máximo de iteraciones menor o igual a 90000 del problema 3.**

Método	$\beta_1$	$\beta_2$	$\phi$	Iteraciones
Búsqueda directa	-3,4467E+00	-2,7159E+01	4,1560E+01	90000
Simplex flexible.	3,0000E+00	1,5000E+01	1,8414E-12	629
Buzzi Ferraris	3,0002E+00	1,5004E+01	3,6044E-08	13
Gauss Newton	No converge			
Máxima Pendiente	No converge			
Lev. Marquardt	-3,2766E+00	-2,1959E+01	4,5796E+01	7

## 8.4. TABLAS DE RESULTADOS DEL PROBLEMA 4.

Tabla 8.4.1. Resultado obtenido para un número máximo de iteraciones menor o igual a 4000 del problema 4.

Método	Búsqueda D	Simplex F.	Buzzi F.	Gauss N	Máxima P.	Lev. Marq.
$\beta_1$	3,8951950E-01	3,2476585E-01	3,2194144E-01	No converge	No converge	No converge
$\beta_2$	4,2350000E-02	1,4437150E-02	1,3517504E-02			
$\beta_3$	4,4394000E-02	4,5764001E-02	4,4878729E-02			
$\beta_4$	3,2320750E-01	3,4542096E-01	3,6465737E-01			
$\beta_5$	1,9754500E+00	2,6382559E+00	2,8439597E+00			
$\beta_6$	1,2200000E-03	1,1899155E-03	1,1821991E-03			
$\beta_7$	3,5000000E-02	2,2347809E-02	2,2754240E-02			
$\beta_8$	3,0799000E-02	2,9575021E-02	3,0045215E-02			
$\beta_9$	9,0311500E-02	1,0826341E-01	1,0694820E-01			
$\beta_{10}$	3,3410156E+02	1,2500379E+02	1,1274072E+02			
$\beta_{11}$	1,0273438E+02	2,7500518E+01	2,5363255E+01			
$\beta_{12}$	3,2132813E+01	5,1013914E+01	5,1751119E+01			
$\beta_{13}$	1,6019531E+02	5,4828662E+01	5,8103325E+01			
$\beta_{14}$	3,7414063E+01	8,8063133E+01	9,1318976E+01			
$\phi$	8,0547324E+00	6,4313331E+00	6,4258286E+00			
Iteraciones	4000	3126	13			
Tiempo (s)	188	94	7			

## 8.5. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 1

El modelo matemático que presenta este problema es de tipo lineal con respecto a los parámetros a optimizar. La figura 8.1.1 muestra una gráfica de la superficie de la función objetivo en el espacio de parámetros.

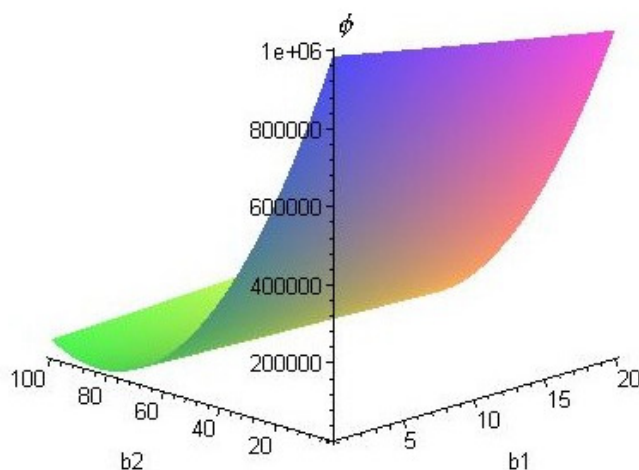


Figura 8.1.1. Gráfico del espacio de la función objetivo con respecto a los parámetros (problema 1).



Como puede apreciarse en esta gráfica, la superficie de la función objetivo en el espacio de los parámetros es continua y bastante regular, por tal motivo se ha de esperar que ningún método fracase en el proceso de búsqueda del mínimo.

La tabla 8.1.1 y 8.1.2 presenta los resultados obtenidos en el problema 1 para un número de iteraciones exactamente igual a 85 y para un número máximo de iteraciones menor o igual a 1000 o hasta que se cumpla la condición de salida propia del método.

Como era de esperar, se puede apreciar según la tabla 8.1.1 que el método de búsqueda directa implementado por Hooke y Jeeves no le fue suficiente 85 iteraciones para poder llegar a la solución, debido a que este método es de convergencia extremadamente lenta, por lo que necesita de un número considerable de iteraciones, según la naturaleza del problema. En la tabla 8.1.2 se observa una gran mejora en la solución de este método en cuanto a lo bien que fueron ajustados los parámetros, pero fue el método que más tardó en converger, necesitando 305 iteraciones, el cual es un número muy elevado en comparación con los otros métodos.

El método de máxima pendiente, no reportó a simple vista resultados satisfactorios, pero podemos afirmar que la mejora en la función objetivo con respecto a la inicial fue bastante notable.

El método de máxima pendiente tal vez no nos reporte una solución definitiva en la optimización de parámetros, pero si nos puede aproximar, en forma considerable a un valor muy cercano a los de convergencia hacia el óptimo.

Con respecto al método de simplex flexible, se puede observar que convergió en un tiempo relativamente moderado, pero el método ideado por Buzzi Ferraris demostró ser más eficiente en este caso.

El método de Gauss Newton resultó ser el más eficiente, lo cual no siempre es lo común. Debido a la naturaleza del problema, este método no tuvo inconveniente en alcanzar la solución en solo 3 iteraciones, superando incluso al método de Levenberg Marquardt. El método de Gauss Newton es muy eficaz cuando el punto inicial de los parámetros es cercano a algún punto de convergencia.

Tal vez el método de Levenberg Marquardt no demostró en este caso ser superior al de Gauss Newton, pero existen algunos factores que pueden influir en su velocidad de convergencia, por ejemplo, el factor  $\lambda$  juega un papel muy importante. El valor inicial de  $\lambda$  con que fue realizado este problema fue de 1, si este valor hubiese sido 0.1 el método habría convergido en 10 iteraciones.

La figura 8.1.2 muestra una gráfica de las respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales para el método de Gauss Newton.

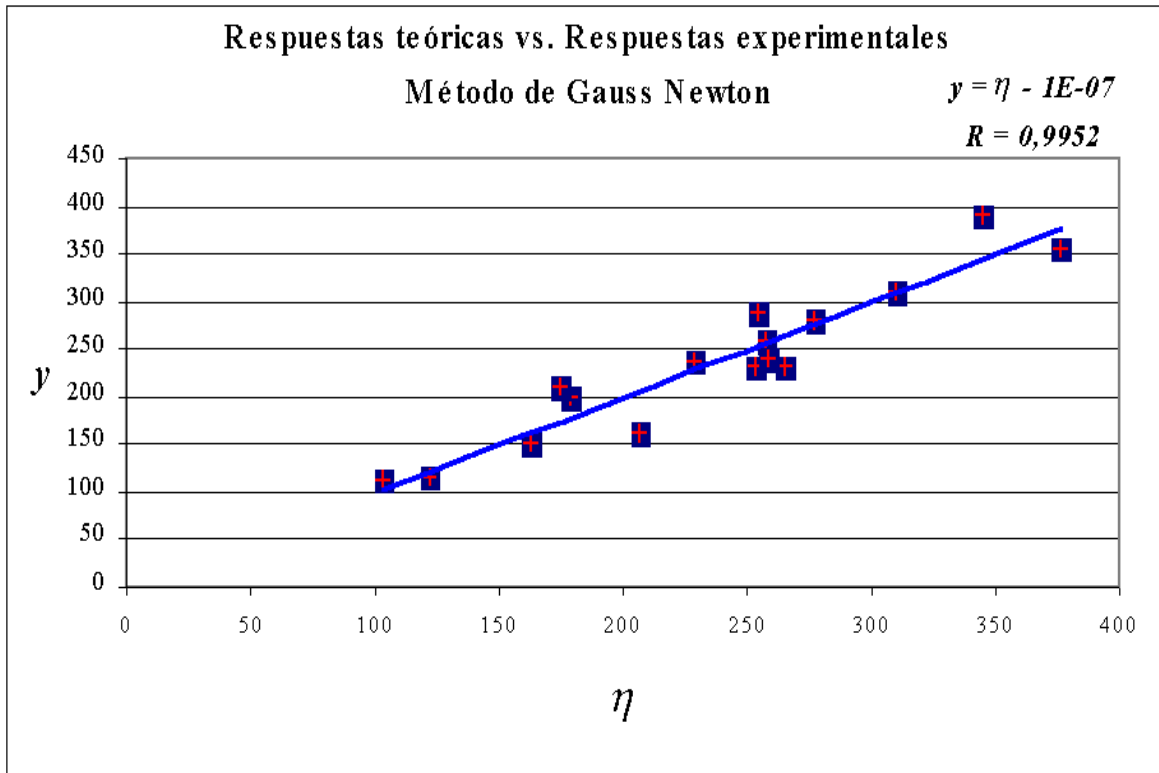


Figura 8.1.2. Gráfica de la respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales del problema 1.

En esta gráfica se puede apreciar que los valores teóricos se corresponden de manera aceptable con los experimentales, por lo que se puede afirmar que el modelo matemático se aproxima a la realidad física del proceso utilizando los valores de los parámetros optimizados.

## 8.6. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 2

En este caso el modelo matemático es moderadamente no lineal, y debido a la poca cantidad de data experimental que se suministra para este problema en proporción con el número parámetro, ha de esperarse que no sea de tan fácil resolución en comparación con el anterior.

Debido a que este modelo contiene más de dos parámetros es imposible visualizar la superficie de la función objetivo con respecto a los parámetros, pero para tener una idea del grado de no linealidad del modelo las figuras 8.2.1, 8.2.2 y 8.2.3 muestran la superficie del modelo manteniendo constante respectivamente los parámetros  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  y  $\beta_3$ .

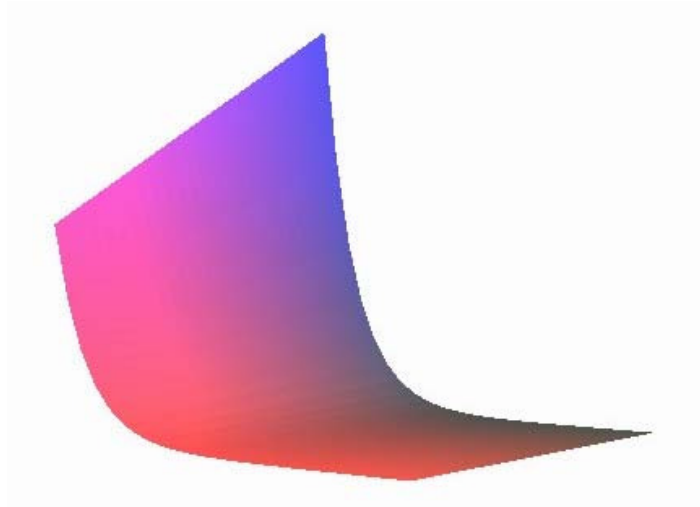


Figura 8.2.1. Gráfica de la superficie del modelo matemático del problema 2 a  $\beta_1$  constante.

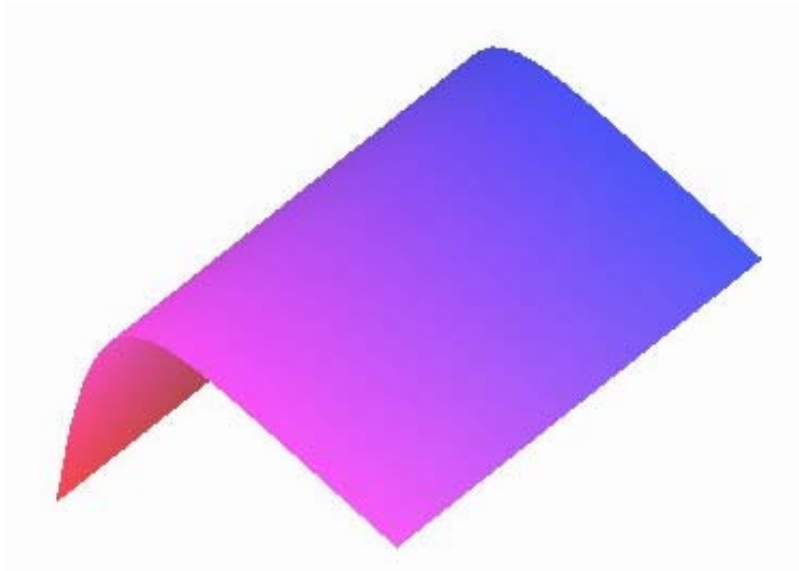


Figura 8.2.2. Gráfica de la superficie del modelo matemático del problema 2 a  $\beta_2$  constante.

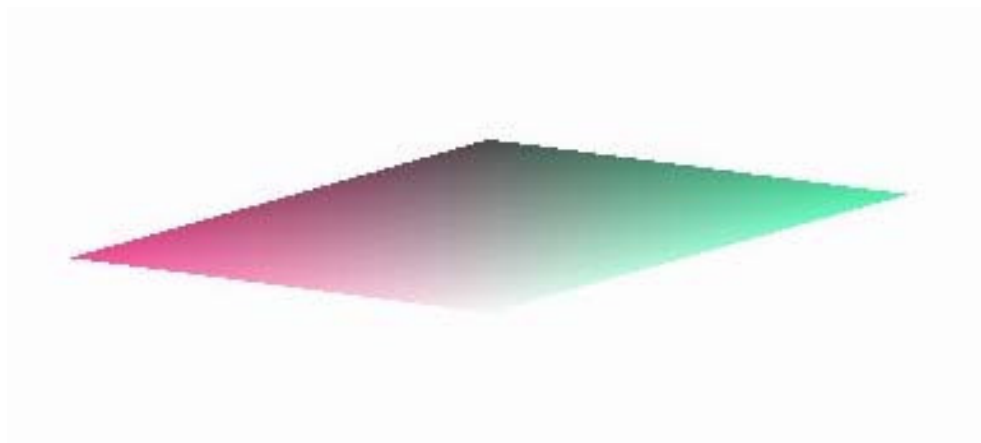


Figura 8.2.3. Gráfica de la superficie del modelo matemático del problema 2 a  $\beta_3$  constante.

La tabla 8.2.1 y 8.2.2 presenta respectivamente los resultados obtenidos en el problema 2 para un número de iteraciones exactamente igual a 12 y para un número máximo de iteraciones menor o igual a 200000 o hasta que se cumpla la condición de salida propia del método.

La naturaleza de este problema es mucho más compleja que el del caso anterior, y el punto inicial de búsqueda está situado en un lugar de difícil convergencia, por tal motivo solo los métodos de Levenberg Marquardt y de Buzzi Ferraris lograron converger para en la tabla 8.2.1. Los métodos de simplex flexible y de búsqueda directa de Hooke y Jeeves se encontraban en camino de convergencia, pero el máximo número de iteraciones permitidas en la tabla 8.2.1 les impidió llegar a la solución en tan corto tiempo.

Aquí queda demostrada una vez más la extrema lentitud de convergencia del método de Hooke y Jeeves. Este es un método muy estable y seguro pero puede tardar hasta 1000 veces más que cualquier otro.

El método de simplex flexible es bastante robusto y en comparación con el método de Hooke y Jeeves es más rápido, pero en la mayoría de los casos no logra superar al de Buzzi Ferraris, pero el ajuste de parámetro es un poco más exacto.

En cuanto al método de Buzzi Ferraris podemos decir que sigue demostrando superioridad entre los métodos de tipo no derivativo, y para ser un método de búsqueda directa es extremadamente rápido.

El método de Gauss Newton es muy inestable y extremadamente sensible a los cambios que realiza la matriz jacobiana, ya para la tabla 8.2.1 se podía apreciar que se estaba divergiendo, por lo que era lógico esperar que este método no reportara resultado alguno, sin embargo, si el punto inicial de búsqueda hubiese sido 500, -150 y 0.2 respectivamente, este método habría logrado su convergencia en 12 iteraciones, ya que se encontraría en un punto cercano a la zona de convergencia, y si el factor que acelera el paso de búsqueda lo hubiésemos reducido de 1 a 0.9 este método habría logrado su convergencia en 36 iteraciones debido a que reduciríamos la posibilidad de que los elementos de la matriz jacobiana se acercasen a cero.

El método de Levenberg Marquardt demostró ser el más eficiente, pero esto no siempre es así, el éxito de este método dependerá mucho de la naturaleza del problema, sin embargo, lo que si se puede afirmar es que este método es uno de los más estables entre los métodos de tipo derivativo.

La figura 8.2.4 muestra una gráfica de las respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales para el método de Levenberg Marquardt.

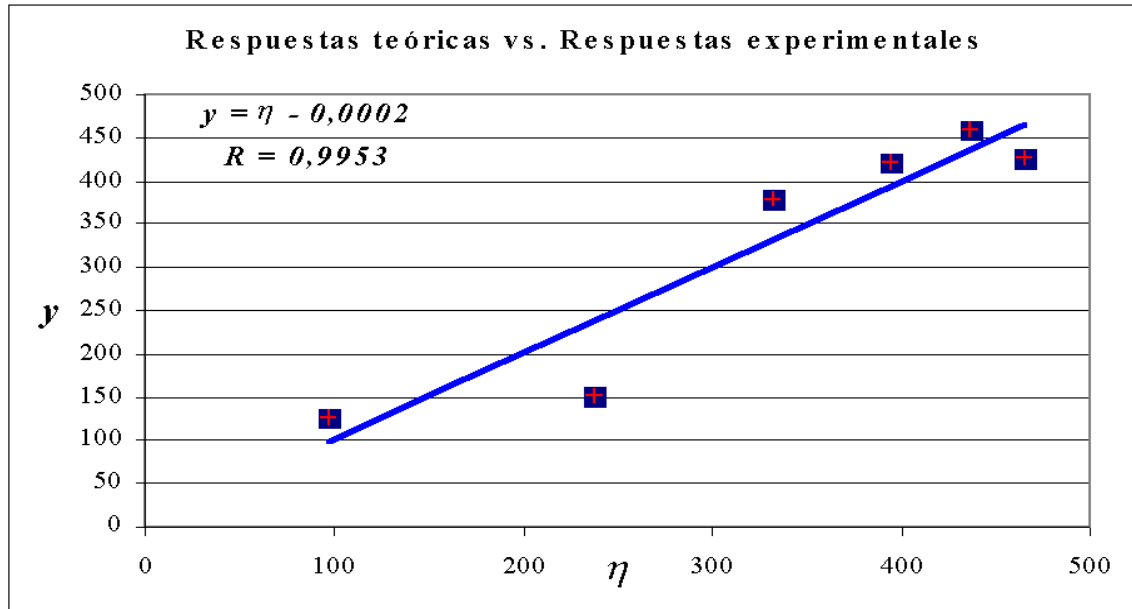


Figura 8.2.4. Gráfica de la respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales del problema 2.

### 8.7. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 3

El modelo matemático que presenta este problema es un modelo no lineal con respecto a los parámetros a optimizar. La función objetivo empleada se encuentra en su forma implícita. La figura 8.3.1 muestra una gráfica del espacio de parámetros con respecto a la función objetivo.

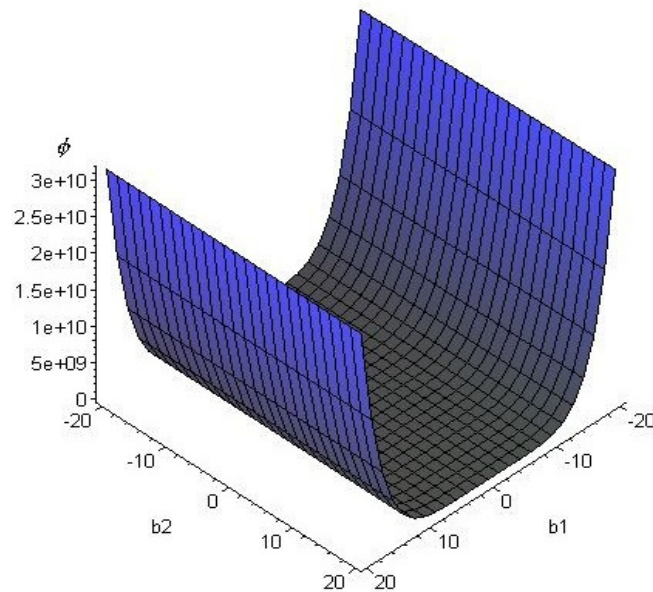


Figura 8.3.1. Gráfico del espacio de la función objetivo con respecto a los parámetros (problema 3).

Como puede apreciarse en la figura 8.3.1 la superficie del modelo es muy aplanada en la zona cercana al mínimo, esto indica que muy posiblemente todos los métodos que basan sus estrategias de búsqueda en las derivadas parciales con respecto a los parámetros fracasen rotundamente, debido a que la matriz jacobiana correspondiente a los puntos presentes en la zona aplanada de la superficie tiendan a hacerla singular, y esto inevitablemente impide que estos métodos logren proseguir con la búsqueda.

La tabla 8.3.1, 8.3.2 y 8.3.3 presenta respectivamente los resultados obtenidos en el problema 3 para un número de iteraciones exactamente igual a 18, para un número de iteraciones exactamente igual 1210 y para un número máximo de iteraciones menor o igual a 90000 o hasta que se cumpla la condición de salida propia del método.

Como era de esperar todos los métodos de tipo derivativo fracasaron rotundamente. En las tablas mostradas anteriormente se puede apreciar entonces que el método de Gauss Newton y máxima pendiente se inestabilizaron completamente, el método de Levenberg Marquardt al parecer quedo atrapado en un mínimo local para 18 iteraciones, y cuando se le permitió realizar 1210 iteraciones avanzo un poco, pero igualmente no logro alcanzar el mínimo.

Se esperaba que el método de búsqueda directa implementado por Hooke y Jeeves lograra converger para 90000 iteraciones, pero al parecer este método se encontraba muy lejos de la solución y se dirigió a otros mínimos locales.

El método de simplex flexible demostró ser el más eficiente en cuanto a la cercanía de la solución para 1210 iteraciones, pero el método de Buzzi Ferraris, a pesar de no reportar resultados tan exactos como los de simplex flexible aportó una solución muy aceptable para un mínimo de 13 iteraciones.

## **8.8. RESULTADOS OBTENIDOS POR EL PROBLEMA 4**

A diferencia de los casos anteriores, aquí se presenta ahora un modelo que contiene múltiples respuestas, y que también involucra la resolución de ecuaciones diferenciales.

La tabla 8.4.1 presenta los resultados obtenidos en el problema 4 para un número máximo de iteraciones menor o igual a 4000 o hasta que se cumpla la condición de salida propia del método.

La complejidad de este problema es muy superior a la de todos los anteriores, este es un sistema de múltiples respuestas, cuya superficie de parámetros es imposible de visualizar, pero de seguro debe presentar una superficie extremadamente compleja.

Al igual que el caso anterior todos los métodos de tipo derivativo fracasaron, este puede ser debido a la forma de la superficie de la función objetivo con respecto a los parámetros, que debe de ser extremadamente aplanada en muchas de sus regiones.

El método de búsqueda directa de Buzzi Ferraris resultó ser el que reporto los mejores resultados, debido a que sus técnicas de búsqueda son mucho más eficiente.

El método de simplex flexible reporto muy buenos resultados, incluso mejores que los reportados en la bibliografía, pero no logro superar al de Buzzi Ferraris, algo lógico de esperar para este tipo de problema.

El método de Hooke y Jeeves no logro superar a los otros métodos de búsqueda directa, nuevamente el numero máximo de iteraciones permitidas no le fue suficiente. Pero por lo menos se puede apreciar que se encontraba en camino hacia la convergencia.

Esto nos demuestra que la eficiencia de un método dependerá notablemente de la naturaleza del problema, por lo que la integración de todos estos métodos en el presente trabajo de grado resulta muy útil, ya que podremos comparar sin mayor dificultad los resultados obtenidos por los distintos métodos y seleccionar el mejor en un muy corto periodo de tiempo.

La figura 8.4.2 muestra una gráfica de las respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales para el método de búsqueda directa de Buzzi Ferraris, con la finalidad de tener una idea del grado de ajuste de los parámetros.

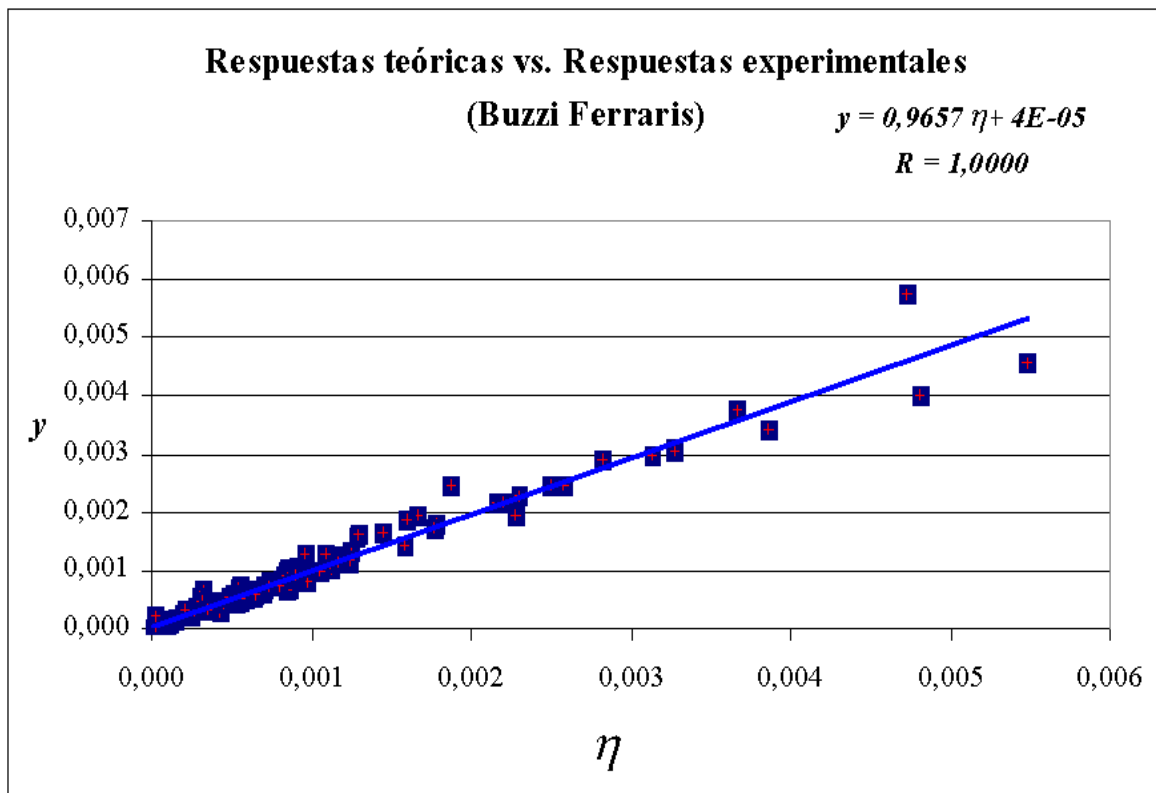


Figura 8.4.2. Gráfica de la respuestas teóricas vs. las respuestas experimentales del problema 4.

## 9. CONCLUSIONES

La correcta definición de la función objetivo a emplear en un problema de optimización podrá influir de manera notable en el ajuste de parámetros. En las diversas bibliografías recomiendan con mucha frecuencia el empleo de una función objetivo de mínimos cuadrados, pero esta no es suficiente para atacar todos los tipos de problemas, sobre todo cuando los datos obtenidos en forma experimental contienen considerables errores de medición, por lo que se hace necesario la introducción de pesos con la finalidad de minimizar los errores asociados a dichos valores experimentales, pero esto no necesariamente resolverá dicho problema.

Para obtener resultados aceptables, no solamente es necesario definir correctamente la función objetivo. Otro aspecto que podrá influir notablemente en el proceso de optimización es lo referente al punto inicial de búsqueda. Cuando la superficie en el espacio de parámetros presentan muchos valles y picos, es muy probable que la solución que se reporte no sea la más apropiada, ya que dicha solución podrá apuntar hacia un máximo o mínimo local, por tal motivo es muy importante que se conozca el significado físico de los parámetros, para así poder definir un punto de partida lo más cercano posible a la solución óptima. También es recomendable acotar los parámetros para garantizar que verdaderamente nos encontremos dentro del universo válido de estudio.

Es importante destacar que los programas de optimización no hacen milagros, es decir, si el modelo matemático no es el más adecuado, por más que se intenten afinar el código del programa de optimización jamás se podrá conseguir un resultado satisfactorio, lo único que queda es intentar probar con otros modelos que tal vez se aproximen más a la realidad física del proceso..

Es aconsejable, en la medida de lo posible, encontrar la manera de normalizar los parámetros a ajustar con la finalidad de reducir el rango de estudio. Esto podrá ayudar a minimizar el espacio de exploración de valores iniciales, además de facilitar el proceso de búsqueda.

La naturaleza del modelo matemático influye directamente en el fracaso o en el éxito que pueda tener un determinado método de optimización. Por ejemplo, cuando la superficie en el espacio de los parámetros es extremadamente irregular, es decir presenta demasiados valles, picos, es muy encorvada, etc., provoca por lo general que los métodos basados en las derivadas parciales del modelo con respecto a los parámetros fracasen rotundamente. Por otra parte, cuando la superficie, por decirlo de alguna manera, es más lisa o regular, los métodos de tipo derivativo por lo general reportan soluciones en un número de iteraciones mucho menor a los que podrán reportar los métodos de búsqueda directa.

Por otra parte, refiriéndonos ahora en forma más individual hacia cada uno de los métodos podemos decir que los métodos de búsqueda directa son de convergencia más



lenta pero sustancialmente más estable y segura que los métodos de tipo derivativo. Entre los métodos de búsqueda directa, el implementado por Hooke y Jeeves es de convergencia extremadamente lenta, pero en algunas ocasiones es el único capaz de conducirnos a puerto seguro.

El otro método de búsqueda directa, el implementado por Buzzi Ferraris es por lo general de convergencia mucho más rápida y segura, y con gran estabilidad. El método de simplex flexible, también es un método de búsqueda tan robusto como los dos anteriores, por lo general converge mucho más rápido que el método de Hooke y Jeeves pero no más que el de Buzzi Ferraris, pero sigue siendo un método muy poderoso e interesante.

El método de Gauss Newton es de tipo derivativo y se puede considerar como el de convergencia más rápida, pero es muy inseguro e inestable. Con mucha frecuencia este método fracasa, sobre todo cuando el punto inicial de búsqueda se encuentra muy alejado del óptimo.

El método de máxima pendiente también es de tipo derivativo y es aun más inestable que el de Gauss Newton, y rara vez da resultados aceptables, pero es ideal para explorar parámetros cuando no se tiene un punto de partida en donde comenzar la búsqueda iterativa, ya que debido a que este método apunta en la dirección de máxima pendiente como su propio nombre lo indica, hace que este sea poco sensible a la calidad de la aproximación inicial, arrojando así resultado que muchas veces apunta hacia algún mínimo o máximo local, es decir cercano a algún punto de convergencia hacia el óptimo.

Por último tenemos al método de Levenberg Marquardt, que no es más que una alteración del método de Gauss Newton, tal que termina siendo un híbrido entre los dos métodos de tipo derivativos expuestos anteriormente. Este método es de convergencia más lenta que el de Gauss Newton cuando el punto inicial de búsqueda se encuentra cercano a la solución óptima. El método de Levenberg Marquardt es sustancialmente más estable y seguro que los métodos de Gauss Newton y de máxima pendiente.

El método de Marquardt se puede considerar como unos de los más rápidos y seguros, pero cuando la superficie de los parámetros es extremadamente irregular es recomendable utilizar algún método de búsqueda directa, preferiblemente el desarrollado por Buzzi Ferraris o el de simplex flexible.

En términos generales no se podría decir estrictamente que un método es mejor que otro, ya que cada método demostrará, según el tipo de problemas a resolver si es más eficiente o no que otro. Ni siquiera el método de máxima pendiente, que en muy rara ocasiones da resultados aceptables, se podrá catalogar como un método inservible, ya que aunque no nos reporte una solución adecuada, por lo menos nos podría servir para mejorar el punto inicial de búsqueda, mientras que los otros métodos no lograrían avanzar nada en lo absoluto.

## 10. RECOMENDACIONES

Finalmente la aplicación es un programa de fácil modificación debido a su diseño modular, y en un futuro se le podría agregar opciones tales como:

- Implementación de módulos gráficos que permitan visualizar superficies.
- Implementación de otros métodos de optimización de basados en algoritmos genéticos.
- Implementar herramientas estadísticas que permitan determinar la bondad del ajuste.
- Normalizar los parámetros a ajustar con la finalidad de reducir el rango de estudio.

## 11. REFERENCIAS

### Bibliografía:

1. **G. BUZZI FERRARIS A. CASAPOLLO.** Revista de Ingeniería Química. Milán. 1972.
2. **DAVID M. HIMMELBLAU.** Process Analysis by Statistical Methods. John Wiley & Sons, Inc. New York. 1970.
3. **JAMES L. KUESTER, JOE H. MIZE.** Optimization Techniques with Fortran. McGraw – Hill. New York. 1973.
4. **PAPA J.** “M3D”, Programa para ajustar datos experimentales a funciones no lineales. Universidad Central de Venezuela. Facultad de Ingeniería. 1997.
5. **PICO S. OCTAVIO A.** Deshidrogenación Catalítica Oxidativa de Etilbenceno a Estireno. Universidad Central de Venezuela. Facultad de Ingeniería. Comisión de Estudios para Graduados. Marzo 1983.

### Enlaces Web:

- a. **BAEZA.** Optimización de modelos. <http://www.uv.es/~baeza/modopti.html>. 2001.
- b. **CHEMKEYS.** Planteamiento Experimental y Optimización. O Seu Site de Química. <http://www.chemkeys.com>. 1999.

## **APÉNDICE A. RESULTADOS DETALLADO DE LOS PROBLEMAS PROPUESTOS**

# INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 1

## PARA 85 ITERACIONES

### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.617752356152341e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 85

Número de iteraciones realizadas = 85

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.004640139412109e+000

Corte con el eje Y = -1.155606394032995e+000

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
=====	=====	=====	=====	=====	=====
1	1.000000000000000e+000	1.459375000000000e+001	Libre	-1.359375000000000e+001	1.359375000000000e+003
2	1.000000000000000e+000	7.865625000000000e+001	Libre	-7.765625000000000e+001	7.765625000000000e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
=====	=====	=====	=====	=====	=====
1	1	1.042618750000000e+002	1.120000000000000e+002	7.738125000000011e+000	6.909040178571438e+000
2	1	1.223528125000000e+002	1.150000000000000e+002	7.352812500000013e+000	6.393750000000012e+000
3	1	1.632540625000000e+002	1.520000000000000e+002	1.125406250000000e+001	7.403988486842107e+000
4	1	1.789853125000000e+002	1.990000000000000e+002	2.001468750000001e+001	1.005763190954774e+001
5	1	2.073015625000000e+002	1.610000000000000e+002	4.630156250000002e+001	2.875873447204970e+001
6	1	1.750525000000000e+002	2.090000000000000e+002	3.394749999999999e+001	1.624282296650717e+001
7	1	2.293253125000000e+002	2.370000000000000e+002	7.674687500000005e+000	3.238264767932492e+000
8	1	2.537087500000000e+002	2.310000000000000e+002	2.270875000000001e+001	9.830627705627709e+000
9	1	2.655071875000000e+002	2.330000000000000e+002	3.250718749999999e+001	1.395158261802575e+001
10	1	2.576415625000000e+002	2.590000000000000e+002	1.358437500000036e+000	5.244932432432573e-001
11	1	2.544953125000000e+002	2.870000000000000e+002	3.250468750000002e+001	1.132567508710802e+001
12	1	2.584281250000000e+002	2.400000000000000e+002	1.842812500000002e+001	7.678385416666676e+000
13	1	2.773056250000000e+002	2.810000000000000e+002	3.694375000000036e+000	1.314724199288269e+000
14	1	3.095546875000000e+002	3.110000000000000e+002	1.445312500000000e+000	4.647307073954984e-001
15	1	3.441634375000000e+002	3.920000000000000e+002	4.783656249999996e+001	1.220320471938775e+001
16	1	3.756259375000000e+002	3.570000000000000e+002	1.862593749999996e+001	5.217349439775900e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.869823111537387e+002

Índice general de correlación = 9.478062703861634e-001

### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna  
 Función Objetivo = 9.615881261701188e+003  
 Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 85  
 Número de iteraciones realizadas = 85  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = 9.999999933298845e-001  
 Corte con el eje Y = 1.508163424313494e-006

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350585922243420e+001	Libre	-1.250585922243420e+001	1.250585922243419e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122649271462e+001	Libre	-7.802122649271462e+001	7.802122649271461e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900574241289e+002	1.120000000000000e+002	8.409942575871142e+000	7.508877299884949e+000
2	1	1.217649395174532e+002	1.150000000000000e+002	6.764939517453229e+000	5.882556102133242e+000
3	1	1.628559772936648e+002	1.520000000000000e+002	1.085597729366481e+001	7.142090324779478e+000
4	1	1.786602225922077e+002	1.990000000000000e+002	2.033977740779227e+001	1.022099367225742e+001
5	1	2.071078641295850e+002	1.610000000000000e+002	4.610786412958501e+001	2.863842492520809e+001
6	1	1.747091612675720e+002	2.090000000000000e+002	3.429083873242797e+001	1.640709987197511e+001
7	1	2.292338075475451e+002	2.370000000000000e+002	7.766192452454902e+000	3.276874452512617e+000
8	1	2.537303877602867e+002	2.310000000000000e+002	2.273038776028665e+001	9.839994701422791e+000
9	1	2.655835717341938e+002	2.330000000000000e+002	3.258357173419381e+001	1.398436555115614e+001
10	1	2.576814490849224e+002	2.590000000000000e+002	1.318550915077651e+000	5.090930174044984e-001
11	1	2.545206000252138e+002	2.870000000000000e+002	3.247939997478622e+001	1.131686410271297e+001
12	1	2.584716613498495e+002	2.400000000000000e+002	1.847166134984951e+001	7.696525562437297e+000
13	1	2.774367557081010e+002	2.810000000000000e+002	3.563244291898968e+000	1.268058466867960e+000
14	1	3.098354585701140e+002	3.110000000000000e+002	1.164541429885958e+000	3.744506205421087e-001
15	1	3.446047982269085e+002	3.920000000000000e+002	4.739520177309151e+001	1.209061269721722e+001
16	1	3.762132888239943e+002	3.570000000000000e+002	1.921328882399428e+001	5.381873620166464e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615500849e+002  
 Índice general de correlación = 9.478167039877247e-001

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización  
 Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701456e+003  
 Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 85  
 Número de iteraciones realizadas = 85  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = 1.000000055369741e+000  
 Corte con el eje Y = -1.367748067894791e-005

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350587357017646e+001	Libre	-1.250587357017646e+001	1.250587357017646e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122159024927e+001	Libre	-7.802122159024927e+001	7.802122159024927e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900661830606e+002	1.120000000000000e+002	8.409933816939386e+000	7.508869479410166e+000
2	1	1.217649471488180e+002	1.150000000000000e+002	6.764947148817967e+000	5.882562738102580e+000
3	1	1.628559823757475e+002	1.520000000000000e+002	1.085598237574754e+001	7.142093668254963e+000
4	1	1.786602266937974e+002	1.990000000000000e+002	2.033977330620257e+001	1.022099161115707e+001
5	1	2.071078664662872e+002	1.610000000000000e+002	4.610786646628719e+001	2.863842637657589e+001
6	1	1.747091656142850e+002	2.090000000000000e+002	3.429083438571502e+001	1.640709779220814e+001
7	1	2.292338085115570e+002	2.370000000000000e+002	7.766191488443042e+000	3.276874045756558e+000
8	1	2.537303872045342e+002	2.310000000000000e+002	2.273038720453423e+001	9.839994460837326e+000
9	1	2.655835704430716e+002	2.330000000000000e+002	3.258357044307161e+001	1.398436499702644e+001
10	1	2.576814482840467e+002	2.590000000000000e+002	1.318551715953333e+000	5.090933266229086e-001
11	1	2.545205994204367e+002	2.870000000000000e+002	3.247940057956328e+001	1.131686431343668e+001
12	1	2.584716604999492e+002	2.400000000000000e+002	1.847166049994922e+001	7.696525208312176e+000
13	1	2.774367536816090e+002	2.810000000000000e+002	3.563246318391009e+000	1.268059188039505e+000
14	1	3.098354545336112e+002	3.110000000000000e+002	1.164545466388802e+000	3.744519184529909e-001
15	1	3.446047920333209e+002	3.920000000000000e+002	4.739520796667910e+001	1.209061427721406e+001
16	1	3.762132806694206e+002	3.570000000000000e+002	1.921328066942056e+001	5.381871335972145e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615501040e+002  
Índice general de correlación = 9.478167039877232e-001

#### Método de optimización: Gauss Newton

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701190e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 85

Número de iteraciones realizadas = 85

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 9.999999999999987e-001

Corte con el eje Y = 0.000000000000000e+000

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350586064051236e+001	Libre	-1.250586064051236e+001	1.250586064051236e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122596563379e+001	Libre	-7.802122596563379e+001	7.802122596563379e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900582413349e+002	1.120000000000000e+002	8.409941758665141e+000	7.508876570236733e+000
2	1	1.217649402134307e+002	1.150000000000000e+002	6.764940213430648e+000	5.882556707330998e+000
3	1	1.628559777155602e+002	1.520000000000000e+002	1.085597771556022e+001	7.142090602342247e+000
4	1	1.786602229086870e+002	1.990000000000000e+002	2.033977709131304e+001	1.022099351322263e+001
5	1	2.071078642563152e+002	1.610000000000000e+002	4.610786425631517e+001	2.863842500392246e+001
6	1	1.747091616104053e+002	2.090000000000000e+002	3.429083838959471e+001	1.640709970794006e+001
7	1	2.292338075266926e+002	2.370000000000000e+002	7.766192473307399e+000	3.276874461311139e+000
8	1	2.537303875760391e+002	2.310000000000000e+002	2.273038757603908e+001	9.839994621661939e+000
9	1	2.655835714708841e+002	2.330000000000000e+002	3.258357147088412e+001	1.398436543814769e+001
10	1	2.576814488743207e+002	2.590000000000000e+002	1.318551125679278e+000	5.090930987178679e-001
11	1	2.545205998356954e+002	2.870000000000000e+002	3.247940016430459e+001	1.131686416874725e+001
12	1	2.584716611339771e+002	2.400000000000000e+002	1.847166113397708e+001	7.696525472490450e+000
13	1	2.774367553657292e+002	2.810000000000000e+002	3.563244634270802e+000	1.268058588708471e+000
14	1	3.098354580116391e+002	3.110000000000000e+002	1.164541988360895e+000	3.744508001160435e-001
15	1	3.446047974365180e+002	3.920000000000000e+002	4.739520256348203e+001	1.209061289884746e+001
16	1	3.762132878227715e+002	3.570000000000000e+002	1.921328782277146e+001	5.381873339711894e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615500850e+002

Índice general de correlación = 9.478167039877247e-001

#### Método de optimización: Máxima pendiente

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.906097868583320e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 85

Número de iteraciones realizadas = 85

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.060660589660667e+000

Corte con el eje Y = -1.524334703051530e+001

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	2.710500225168645e+001	Libre	-2.610500225168645e+001	2.610500225168645e+003
2	1.000000000000000e+000	7.450189696490453e+001	Libre	-7.350189696490453e+001	7.350189696490454e+003



Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.120371647916776e+002	1.120000000000000e+002	3.716479167759701e-002	3.318284971214019e-002
2	1	1.291726010936057e+002	1.150000000000000e+002	1.417260109360566e+001	1.232400095096145e+001
3	1	1.679135875153560e+002	1.520000000000000e+002	1.591358751535600e+001	1.046946547062895e+001
4	1	1.828139669083369e+002	1.990000000000000e+002	1.618603309166309e+001	8.133684970684971e+000
5	1	2.096346498157026e+002	1.610000000000000e+002	4.863464981570255e+001	3.020785702838668e+001
6	1	1.790888720600917e+002	2.090000000000000e+002	2.991112793990831e+001	1.431154446885565e+001
7	1	2.304951809658758e+002	2.370000000000000e+002	6.504819034124182e+000	2.744649381486997e+000
8	1	2.535907690249962e+002	2.310000000000000e+002	2.259076902499623e+001	9.779553690474559e+000
9	1	2.647660535697319e+002	2.330000000000000e+002	3.176605356973192e+001	1.363349938615104e+001
10	1	2.573158638732414e+002	2.590000000000000e+002	1.684136126758574e+000	6.502456087870941e-001
11	1	2.543357879946452e+002	2.870000000000000e+002	3.266421200535476e+001	1.138125853845114e+001
12	1	2.580608828428905e+002	2.400000000000000e+002	1.806088284289052e+001	7.525367851204385e+000
13	1	2.759413381144676e+002	2.810000000000000e+002	5.058661885532445e+000	1.800235546452827e+000
14	1	3.064871158700785e+002	3.110000000000000e+002	4.512884129921531e+000	1.451088144669303e+000
15	1	3.392679505346365e+002	3.920000000000000e+002	5.273204946536350e+001	1.345205343504171e+001
16	1	3.690687093205983e+002	3.570000000000000e+002	1.206870932059826e+001	3.380590846105955e+000

Variancia total debido a la regresión = 7.075784191845229e+002

Índice general de correlación = 9.461970224246099e-001

#### Método de optimización: Levenberg Marquardt

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701185e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 85

Número de iteraciones realizadas = 85

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.000000000000063e+000

Corte con el eje Y = -1.613057036896589e-011

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350586064052737e+001	Libre	-1.250586064052737e+001	1.250586064052736e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122596562883e+001	Libre	-7.802122596562883e+001	7.802122596562883e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900582413442e+002	1.120000000000000e+002	8.409941758655776e+000	7.508876570228372e+000
2	1	1.217649402134389e+002	1.150000000000000e+002	6.764940213438862e+000	5.882556707338141e+000
3	1	1.628559777155658e+002	1.520000000000000e+002	1.085597771556584e+001	7.142090602345949e+000
4	1	1.786602229086916e+002	1.990000000000000e+002	2.033977709130838e+001	1.022099351322029e+001
5	1	2.071078642563180e+002	1.610000000000000e+002	4.610786425631801e+001	2.863842500392423e+001
6	1	1.747091616104102e+002	2.090000000000000e+002	3.429083838958982e+001	1.640709970793771e+001
7	1	2.292338075266941e+002	2.370000000000000e+002	7.766192473305921e+000	3.276874461310515e+000
8	1	2.537303875760390e+002	2.310000000000000e+002	2.273038757603902e+001	9.839994621661914e+000
9	1	2.655835714708833e+002	2.330000000000000e+002	3.258357147088333e+001	1.398436543814735e+001
10	1	2.576814488743204e+002	2.590000000000000e+002	1.318551125679562e+000	5.090930987179777e-001
11	1	2.545205998356953e+002	2.870000000000000e+002	3.247940016430471e+001	1.131686416874728e+001
12	1	2.584716611339767e+002	2.400000000000000e+002	1.847166113397674e+001	7.696525472490308e+000
13	1	2.774367553657277e+002	2.810000000000000e+002	3.563244634272337e+000	1.268058588709017e+000
14	1	3.098354580116355e+002	3.110000000000000e+002	1.164541988364533e+000	3.744508001172132e-001
15	1	3.446047974365122e+002	3.920000000000000e+002	4.739520256348777e+001	1.209061289884892e+001
16	1	3.762132878227637e+002	3.570000000000000e+002	1.921328782276368e+001	5.381873339709713e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615500846e+002  
Índice general de correlación = 9.478167039877247e-001

## PARA UN NÚMERO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 1000

### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701506e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 1000

Número de iteraciones realizadas = 305

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.000000060803225e+000

Corte con el eje Y = -1.481447753143766e-005

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350587463378906e+001	Libre	-1.250587463378906e+001	1.250587463378906e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122116088867e+001	Libre	-7.802122116088867e+001	7.802122116088867e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900667572021e+002	1.120000000000000e+002	8.409933242797862e+000	7.508868966783806e+000
2	1	1.217649476242066e+002	1.150000000000000e+002	6.764947624206556e+000	5.882563151483962e+000
3	1	1.628559826278687e+002	1.520000000000000e+002	1.085598262786866e+001	7.142093834124115e+000
4	1	1.786602268600464e+002	1.990000000000000e+002	2.033977313995362e+001	1.022099152761489e+001
5	1	2.071078664779663e+002	1.610000000000000e+002	4.610786647796633e+001	2.863842638383002e+001
6	1	1.747091658020020e+002	2.090000000000000e+002	3.429083419799804e+001	1.640709770239140e+001
7	1	2.292338084030151e+002	2.370000000000000e+002	7.766191596984868e+000	3.276874091554797e+000
8	1	2.537303869628906e+002	2.310000000000000e+002	2.273038696289063e+001	9.839994356229711e+000
9	1	2.655835701370239e+002	2.330000000000000e+002	3.258357013702391e+001	1.398436486567550e+001
10	1	2.576814480209350e+002	2.590000000000000e+002	1.318551979064978e+000	5.090934282104161e-001
11	1	2.545205991744995e+002	2.870000000000000e+002	3.247940082550051e+001	1.131686439912910e+001
12	1	2.584716602325440e+002	2.400000000000000e+002	1.847166023254397e+001	7.696525096893319e+000
13	1	2.774367533111572e+002	2.810000000000000e+002	3.563246688842810e+000	1.268059319872886e+000
14	1	3.098354539871216e+002	3.110000000000000e+002	1.164546012878418e+000	3.744520941731248e-001
15	1	3.446047912979126e+002	3.920000000000000e+002	4.739520870208736e+001	1.209061446481820e+001
16	1	3.762132797622680e+002	3.570000000000000e+002	1.921327976226803e+001	5.381871081867796e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615501076e+002

Índice general de correlación = 9.478167039877229e-001

#### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701190e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 1000

Número de iteraciones realizadas = 80

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 9.999999920957343e-001

Corte con el eje Y = 1.741869432364213e-006

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350585900539656e+001	Libre	-1.250585900539656e+001	1.250585900539656e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122659023877e+001	Libre	-7.802122659023877e+001	7.802122659023877e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900573182688e+002	1.120000000000000e+002	8.409942681731252e+000	7.508877394402903e+000
2	1	1.217649394340237e+002	1.150000000000000e+002	6.764939434023674e+000	5.882556029585803e+000
3	1	1.628559772609478e+002	1.520000000000000e+002	1.085597726094781e+001	7.142090303255139e+000
4	1	1.786602225789956e+002	1.990000000000000e+002	2.033977742100441e+001	1.022099367889669e+001
5	1	2.071078641514816e+002	1.610000000000000e+002	4.610786415148155e+001	2.863842493880842e+001
6	1	1.747091612494837e+002	2.090000000000000e+002	3.429083875051634e+001	1.640709988062983e+001
7	1	2.292338075967484e+002	2.370000000000000e+002	7.766192403251608e+000	3.276874431751733e+000
8	1	2.537303878397224e+002	2.310000000000000e+002	2.273038783972243e+001	9.839994735810574e+000
9	1	2.655835718282582e+002	2.330000000000000e+002	3.258357182825819e+001	1.398436559152712e+001
10	1	2.576814491692344e+002	2.590000000000000e+002	1.318550830765616e+000	5.090929848515893e+001
11	1	2.545206001056248e+002	2.870000000000000e+002	3.247939989437521e+001	1.131686407469519e+001
12	1	2.584716614351368e+002	2.400000000000000e+002	1.847166143513675e+001	7.696525597973647e+000
13	1	2.774367558167941e+002	2.810000000000000e+002	3.563244183205939e+000	1.268058428187167e+000
14	1	3.098354587187920e+002	3.110000000000000e+002	1.164541281208017e+000	3.744505727356967e+001
15	1	3.446047984184970e+002	3.920000000000000e+002	4.739520158150299e+001	1.209061264834260e+001
16	1	3.762132890545925e+002	3.570000000000000e+002	1.921328905459245e+001	5.381873684759790e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615500850e+002

Índice general de correlación = 9.478167039877247e-001

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261703291e+003  
 Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 1000  
 Número de iteraciones realizadas = 16  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = 1.000000156736530e+000  
 Corte con el eje Y = -3.783536434487109e-005

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350589635900919e+001	Libre	-1.250589635900919e+001	1.250589635900919e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902121358012292e+001	Libre	-7.802121358012292e+001	7.802121358012292e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900798403493e+002	1.120000000000000e+002	8.409920159650696e+000	7.508857285402407e+000
2	1	1.217649589637776e+002	1.150000000000000e+002	6.764958963777588e+000	5.882573011980511e+000
3	1	1.628559900254415e+002	1.520000000000000e+002	1.085599002544151e+001	7.142098700948364e+000
4	1	1.786602327414661e+002	1.990000000000000e+002	2.033976725853393e+001	1.022098857212760e+001
5	1	2.071078696303104e+002	1.610000000000000e+002	4.610786963031038e+001	2.863842834180769e+001
6	1	1.747091720624599e+002	2.090000000000000e+002	3.429082793754006e+001	1.640709470695697e+001
7	1	2.292338094327448e+002	2.370000000000000e+002	7.766190567255222e+000	3.276873657069714e+000
8	1	2.537303856425829e+002	2.310000000000000e+002	2.273038564258286e+001	9.839993784667906e+000
9	1	2.655835676796013e+002	2.330000000000000e+002	3.258356767960129e+001	1.398436381098768e+001
10	1	2.576814463215890e+002	2.590000000000000e+002	1.318553678411035e+000	5.090940843285852e-001
11	1	2.545205977783841e+002	2.870000000000000e+002	3.247940222161591e+001	1.131686488558046e+001
12	1	2.584716584573902e+002	2.400000000000000e+002	1.847165845739022e+001	7.696524357245925e+000
13	1	2.774367497166197e+002	2.810000000000000e+002	3.563250283380285e+000	1.268060599067717e+000
14	1	3.098354472844701e+002	3.110000000000000e+002	1.164552715529908e+000	3.744542493665298e-001
15	1	3.446047812597242e+002	3.920000000000000e+002	4.739521874027577e+001	1.209061702558055e+001
16	1	3.762132666917734e+002	3.570000000000000e+002	1.921326669177336e+001	5.381867420664806e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615502351e+002

Índice general de correlación = 9.478167039877129e-001

#### Método de optimización: Gauss Newton

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701190e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 1000

Número de iteraciones realizadas = 3

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 9.999999999999987e-001

Corte con el eje Y = 0.000000000000000e+000

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350586064051236e+001	Libre	-1.250586064051236e+001	1.250586064051236e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122596563379e+001	Libre	-7.802122596563379e+001	7.802122596563379e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900582413349e+002	1.120000000000000e+002	8.409941758665141e+000	7.508876570236733e+000
2	1	1.217649402134307e+002	1.150000000000000e+002	6.764940213430648e+000	5.882556707330998e+000
3	1	1.628559777155602e+002	1.520000000000000e+002	1.085597771556022e+001	7.142090602342247e+000
4	1	1.786602229086870e+002	1.990000000000000e+002	2.033977709131304e+001	1.022099351322263e+001
5	1	2.071078642563152e+002	1.610000000000000e+002	4.610786425631517e+001	2.863842500392246e+001
6	1	1.747091616104053e+002	2.090000000000000e+002	3.429083838959471e+001	1.640709970794006e+001
7	1	2.292338075266926e+002	2.370000000000000e+002	7.766192473307399e+000	3.276874461311139e+000
8	1	2.537303875760391e+002	2.310000000000000e+002	2.273038757603908e+001	9.839994621661939e+000
9	1	2.655835714708841e+002	2.330000000000000e+002	3.258357147088412e+001	1.398436543814769e+001
10	1	2.576814488743207e+002	2.590000000000000e+002	1.318551125679278e+000	5.090930987178679e-001
11	1	2.545205998356954e+002	2.870000000000000e+002	3.247940016430459e+001	1.131686416874725e+001
12	1	2.584716611339771e+002	2.400000000000000e+002	1.847166113397708e+001	7.696525472490450e+000
13	1	2.774367553657292e+002	2.810000000000000e+002	3.563244634270802e+000	1.268058588708471e+000
14	1	3.098354580116391e+002	3.110000000000000e+002	1.164541988360895e+000	3.744508001160435e-001
15	1	3.446047974365180e+002	3.920000000000000e+002	4.739520256348203e+001	1.209061289884746e+001
16	1	3.762132878227715e+002	3.570000000000000e+002	1.921328782277146e+001	5.381873339711894e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615500850e+002

Índice general de correlación = 9.478167039877247e-001

#### Método de optimización: Máxima pendiente

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.906097868583320e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 1000

Número de iteraciones realizadas = 79

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.060660589660667e+000

Corte con el eje Y = -1.524334703051530e+001

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	2.710500225168645e+001	Libre	-2.610500225168645e+001	2.610500225168645e+003
2	1.000000000000000e+000	7.450189696490453e+001	Libre	-7.350189696490453e+001	7.350189696490454e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.120371647916776e+002	1.120000000000000e+002	3.716479167759701e-002	3.318284971214019e-002
2	1	1.291726010936057e+002	1.150000000000000e+002	1.417260109360566e+001	1.232400095096145e+001
3	1	1.679135875153560e+002	1.520000000000000e+002	1.591358751535600e+001	1.046946547062895e+001
4	1	1.828139669083369e+002	1.990000000000000e+002	1.618603309166309e+001	8.133684970684971e+000
5	1	2.096346498157026e+002	1.610000000000000e+002	4.863464981570255e+001	3.020785702838668e+001
6	1	1.790888720600917e+002	2.090000000000000e+002	2.991112793990831e+001	1.431154446885565e+001
7	1	2.304951809658758e+002	2.370000000000000e+002	6.504819034124182e+000	2.744649381486997e+000
8	1	2.535907690249962e+002	2.310000000000000e+002	2.259076902499623e+001	9.779553690474559e+000
9	1	2.647660535697319e+002	2.330000000000000e+002	3.176605356973192e+001	1.363349938615104e+001
10	1	2.573158638732414e+002	2.590000000000000e+002	1.684136126758574e+000	6.502456087870941e-001
11	1	2.543357879946452e+002	2.870000000000000e+002	3.266421200535476e+001	1.138125853845114e+001
12	1	2.580608828428905e+002	2.400000000000000e+002	1.806088284289052e+001	7.525367851204385e+000
13	1	2.759413381144676e+002	2.810000000000000e+002	5.058661885532445e+000	1.800235546452827e+000
14	1	3.064871158700785e+002	3.110000000000000e+002	4.512884129921531e+000	1.451088144669303e+000
15	1	3.392679505346365e+002	3.920000000000000e+002	5.273204946536350e+001	1.345205343504171e+001
16	1	3.690687093205983e+002	3.570000000000000e+002	1.206870932059826e+001	3.380590846105955e+000

Variancia total debido a la regresión = 7.075784191845229e+002

Índice general de correlación = 9.461970224246099e-001

#### Método de optimización: Levenberg Marquardt

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 9.615881261701186e+003

Función Objetivo Inicial = 9.550199343000001e+005

Número máximo de iteraciones permitidas = 1000

Número de iteraciones realizadas = 11

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.000000000000042e+000

Corte con el eje Y = -1.122126634362802e-011

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	1.000000000000000e+000	1.350586064052361e+001	Libre	-1.250586064052361e+001	1.250586064052361e+003
2	1.000000000000000e+000	7.902122596563014e+001	Libre	-7.802122596563014e+001	7.802122596563014e+003

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.035900582413420e+002	1.120000000000000e+002	8.409941758658050e+000	7.508876570230402e+000
2	1	1.217649402134369e+002	1.150000000000000e+002	6.764940213436901e+000	5.882556707336436e+000
3	1	1.628559777155645e+002	1.520000000000000e+002	1.085597771556454e+001	7.142090602345089e+000
4	1	1.786602229086906e+002	1.990000000000000e+002	2.033977709130943e+001	1.022099351322082e+001
5	1	2.071078642563174e+002	1.610000000000000e+002	4.610786425631744e+001	2.863842500392388e+001
6	1	1.747091616104091e+002	2.090000000000000e+002	3.429083838959093e+001	1.640709970793824e+001
7	1	2.292338075266939e+002	2.370000000000000e+002	7.766192473306120e+000	3.276874461310599e+000
8	1	2.537303875760392e+002	2.310000000000000e+002	2.273038757603922e+001	9.839994621662001e+000
9	1	2.655835714708837e+002	2.330000000000000e+002	3.258357147088373e+001	1.398436543814752e+001
10	1	2.576814488743207e+002	2.590000000000000e+002	1.318551125679278e+000	5.090930987178679e-001
11	1	2.545205998356955e+002	2.870000000000000e+002	3.247940016430451e+001	1.131686416874721e+001
12	1	2.584716611339770e+002	2.400000000000000e+002	1.847166113397702e+001	7.696525472490426e+000
13	1	2.774367553657283e+002	2.810000000000000e+002	3.563244634271712e+000	1.268058588708794e+000
14	1	3.098354580116367e+002	3.110000000000000e+002	1.164541988363339e+000	3.744508001168294e-001
15	1	3.446047974365139e+002	3.920000000000000e+002	4.739520256348607e+001	1.209061289884849e+001
16	1	3.762132878227660e+002	3.570000000000000e+002	1.921328782276595e+001	5.381873339710349e+000

Variancia total debido a la regresión = 6.868486615500848e+002  
Índice general de correlación = 9.478167039877247e-001

## INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 2

### PARA 12 ITERACIONES

#### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 2.367589050094352e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 12

Número de iteraciones realizadas = 12

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.388931181549416e+000

Corte con el eje Y = -1.042482950886503e+002

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	5.200000000000000e+002	Libre	-1.200000000000000e+002	3.000000000000000e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.900000000000000e+002	Libre	5.000000000000000e+001	-3.571428571428572e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.300000000000000e-001	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000



Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.560472424873597e+002	1.270000000000000e+002	2.904724248735971e+001	2.287184447823599e+001
2	1	2.393736491622979e+002	1.510000000000000e+002	8.837364916229791e+001	5.852559547172047e+001
3	1	3.036226071683219e+002	3.790000000000000e+002	7.537739283167815e+001	1.988849415083856e+001
4	1	3.531618681250934e+002	4.210000000000000e+002	6.783813187490665e+001	1.611357051660491e+001
5	1	3.913591938453487e+002	4.600000000000000e+002	6.864080615465127e+001	1.492191438144593e+001
6	1	4.208113024154069e+002	4.260000000000000e+002	5.188697584593058e+000	1.218004127838746e+000

Variancia total debido a la regresión = 7.891963500314505e+003

Índice general de correlación = 8.858753111797806e-001

#### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 7.076867042128684e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 12

Número de iteraciones realizadas = 12

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.388107984625373e+000

Corte con el eje Y = -7.912861112031545e-001

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	4.004321208107251e+002	Libre	-4.321208107251096e-001	1.080302026812774e-001
2	-1.400000000000000e+002	-1.395678791892749e+002	Libre	-4.321208107251096e-001	-3.086577219465068e-001
3	-1.300000000000000e-001	-1.692837100659193e-001	Libre	3.928371006591933e-002	-3.021823851224563e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	7.505996486843901e+001	1.270000000000000e+002	5.194003513156099e+001	4.089766545792204e+001
2	1	1.685098670777282e+002	1.510000000000000e+002	1.750986707772822e+001	1.159593846207167e+001
3	1	2.351200902811877e+002	3.790000000000000e+002	1.438799097188123e+002	3.796303686512197e+001
4	1	2.825992393259650e+002	4.210000000000000e+002	1.384007606740350e+002	3.287428994632661e+001
5	1	3.164419362214633e+002	4.600000000000000e+002	1.435580637785367e+002	3.120827473446451e+001
6	1	3.405646965531706e+002	4.260000000000000e+002	8.543530344682938e+001	2.005523555089891e+001

Variancia total debido a la regresión = 2.358955680709561e+004

Índice general de correlación = 5.972266253321756e-001

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.339010993807082e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 12

Número de iteraciones realizadas = 12

Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = 1.000133680503870e+000  
 Corte con el eje Y = -3.574138181828089e-002

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	5.230423431779504e+002	Libre	-1.230423431779504e+002	3.076058579448761e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.566572089393421e+002	Libre	1.665720893934207e+001	-1.189800638524434e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.999231695858016e-001	Libre	6.992316958580164e-002	-5.378705352753972e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	9.736745412426700e+001	1.270000000000000e+002	2.963254587573300e+001	2.333271328797874e+001
2	1	2.376600832457993e+002	1.510000000000000e+002	8.666008324579934e+001	5.739078360648963e+001
3	1	3.317154963793581e+002	3.790000000000000e+002	4.728450362064189e+001	1.247612232734614e+001
4	1	3.947724138747240e+002	4.210000000000000e+002	2.622758612527605e+001	6.229830433557257e+000
5	1	4.370472251965477e+002	4.600000000000000e+002	2.295277480345226e+001	4.989733652924404e+000
6	1	4.653892333898143e+002	4.260000000000000e+002	3.938923338981431e+001	9.246298917796786e+000

Variancia total debido a la regresión = 4.463369979356939e+003  
 Índice general de correlación = 9.371646757781738e-001

#### Método de optimización: Gauss Newton

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 3.615943637913311e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 12

Número de iteraciones realizadas = 12

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.817651791344396e+000

Corte con el eje Y = -2.959887602525514e+002

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	4.164008714862979e+002	Libre	-1.640087148629795e+001	4.100217871574486e+000
2	-1.400000000000000e+002	-4.459043874332683e+001	Libre	-9.540956125667317e+001	-6.814968661190942e+001
3	-1.300000000000000e-001	-3.078500718747596e-001	Libre	1.778500718747595e-001	-1.368077475959689e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	2.085606086635197e+002	1.270000000000000e+002	8.156060866351970e+001	6.422095170355881e+001
2	1	3.041125711924203e+002	1.510000000000000e+002	1.531125711924203e+002	1.013990537698148e+002
3	1	3.557357134863813e+002	3.790000000000000e+002	2.326428651361874e+001	6.138334172458771e+000
4	1	3.836257614746317e+002	4.210000000000000e+002	3.737423852536830e+001	8.877491336191994e+000
5	1	3.986937085662195e+002	4.600000000000000e+002	6.130629143378047e+001	1.332745465951749e+001
6	1	4.068343553535803e+002	4.260000000000000e+002	1.916564464641971e+001	4.498977616530448e+000

Variancia total debido a la regresión = 1.205314545971104e+004  
Índice general de correlación = 8.193252030602116e-001

**Método de optimización: Máxima pendiente**

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 7.538256891185482e+004  
Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004  
Número máximo de iteraciones permitidas = 12  
Número de iteraciones realizadas = 12  
Tiempo de búsqueda = 0 seg  
Pendiente = 1.883482110065630e+000  
Corte con el eje Y = -1.357069198319000e+002

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	4.000272970426310e+002	Libre	-2.729704263094845e-002	6.824260657737113e-003
2	-1.400000000000000e+002	-1.399612212345971e+002	Libre	-3.877876540292391e-002	-2.769911814494565e-002
3	-1.300000000000000e-001	-1.301241285863752e-001	Libre	1.241285863752273e-004	-9.548352798094406e-002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.317594163825234e+002	1.270000000000000e+002	4.759416382523398e+000	3.747571954742833e+000
2	1	1.932302674585367e+002	1.510000000000000e+002	4.223026745853667e+001	2.796706454207727e+001
3	1	2.406156994276799e+002	3.790000000000000e+002	1.383843005723201e+002	3.651300806657522e+001
4	1	2.771432425411749e+002	4.210000000000000e+002	1.438567574588251e+002	3.417025117786820e+001
5	1	3.053008713832437e+002	4.600000000000000e+002	1.546991286167564e+002	3.363024535146877e+001
6	1	3.270064665157776e+002	4.260000000000000e+002	9.899353348422238e+001	2.323791865826816e+001

Variancia total debido a la regresión = 2.512752297061827e+004  
Índice general de correlación = 5.610143882726101e-001

**Método de optimización: Levenberg Marquardt**

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.339009312059208e+004  
Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004  
Número máximo de iteraciones permitidas = 12  
Número de iteraciones realizadas = 12  
Tiempo de búsqueda = 0 seg  
Pendiente = 1.000000001789433e+000  
Corte con el eje Y = -6.685059353829393e-007

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	5.233035442724386e+002	Libre	-1.233035442724386e+002	3.082588606810964e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.569454952487078e+002	Libre	1.694549524870780e+001	-1.210392517764843e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.996668178666637e-001	Libre	6.966681786666365e-002	-5.358985989743358e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
=====	=====	=====	=====	=====	=====
1	1	9.739157910141074e+001	1.270000000000000e+002	2.960842089858926e+001	2.331371724298367e+001
2	1	2.376159075537996e+002	1.510000000000000e+002	8.661590755379956e+001	5.736152818132420e+001
3	1	3.316737417588909e+002	3.790000000000000e+002	4.732625824110914e+001	1.248713937760136e+001
4	1	3.947646210163821e+002	4.210000000000000e+002	2.623537898361792e+001	6.231681468792855e+000
5	1	4.370838927615088e+002	4.600000000000000e+002	2.291610723849124e+001	4.981762443150268e+000
6	1	4.654702583045953e+002	4.260000000000000e+002	3.947025830459529e+001	9.265318850843965e+000

Variancia total debido a la regresión = 4.463364373530695e+003  
Índice general de correlación = 9.371647573426817e-001

## PARA UN NÚMERO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 200000

### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.339009316357339e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 200000

Número de iteraciones realizadas = 191117

Tiempo de búsqueda = 7 seg

Pendiente = 9.999999871875653e-001

Corte con el eje Y = 3.774832442239217e-006

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
=====	=====	=====	=====	=====	=====
1	4.000000000000000e+002	5.233180963993073e+002	Libre	-1.233180963993073e+002	3.082952409982681e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.569626283645630e+002	Libre	1.696262836456299e+001	-1.211616311754499e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.996504116058350e-001	Libre	6.965041160583496e-002	-5.357723969679612e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
=====	=====	=====	=====	=====	=====
1	1	9.739457660693080e+001	1.270000000000000e+002	2.960542339306920e+001	2.331135700241670e+001
2	1	2.376133346835671e+002	1.510000000000000e+002	8.661333468356713e+001	5.735982429375307e+001
3	1	3.316705186678911e+002	3.790000000000000e+002	4.732948133210891e+001	1.248798979739022e+001
4	1	3.947630319693267e+002	4.210000000000000e+002	2.623696803067332e+001	6.232058914649246e+000
5	1	4.370847884377669e+002	4.600000000000000e+002	2.291521156223308e+001	4.981567730920236e+000
6	1	4.654737521491429e+002	4.260000000000000e+002	3.947375214914291e+001	9.266139002146224e+000

Variancia total debido a la regresión = 4.463364387857796e+003  
Índice general de correlación = 9.371647571342231e-001

**Método de optimización: Simplex flexible**

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.339009311947961e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 200000

Número de iteraciones realizadas = 162

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.000000002141750e+000

Corte con el eje Y = 9.942397452867097e-007

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	5.233055437999592e+002	Libre	-1.233055437999592e+002	3.082638594998980e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.569478517535355e+002	Libre	1.694785175353547e+001	-1.210560839538248e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.996645608353864e-001	Libre	6.966456083538636e-002	-5.358812371952797e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	9.739199017520787e+001	1.270000000000000e+002	2.960800982479213e+001	2.331339356282845e+001
2	1	2.376155519796009e+002	1.510000000000000e+002	8.661555197960087e+001	5.736129270172243e+001
3	1	3.316732965241982e+002	3.790000000000000e+002	4.732670347580176e+001	1.248725685377355e+001
4	1	3.947644004369472e+002	4.210000000000000e+002	2.623559956305280e+001	6.231733862957911e+000
5	1	4.370840139063299e+002	4.600000000000000e+002	2.291598609367014e+001	4.981736107319597e+000
6	1	4.654707368058803e+002	4.260000000000000e+002	3.947073680588034e+001	9.265431175089281e+000

Variancia total debido a la regresión = 4.463364373159870e+003

Índice general de correlación = 9.371647573480771e-001

**Método de optimización: Buzzi Ferraris**

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.339009311955165e+004

Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 200000

Número de iteraciones realizadas = 53

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = 1.000000159339183e+000

Corte con el eje Y = -5.049348601655227e-005

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	5.233050069515432e+002	Libre	-1.233050069515432e+002	3.082625173788579e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.569472311950411e+002	Libre	1.694723119504107e+001	-1.210516513931505e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.996651315506829e-001	Libre	6.966513155068288e-002	-5.358856273129452e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	9.739192197903054e+001	1.270000000000000e+002	2.960807802096946e+001	2.331344726060587e+001
2	1	2.376156555837520e+002	1.510000000000000e+002	8.661565558375202e+001	5.736136131374305e+001
3	1	3.316734080063812e+002	3.790000000000000e+002	4.732659199361882e+001	1.248722743894956e+001
4	1	3.947644451893957e+002	4.210000000000000e+002	2.623555481060430e+001	6.231723232922636e+000
5	1	4.370839655936582e+002	4.600000000000000e+002	2.291603440634185e+001	4.981746610074316e+000
6	1	4.654705936665431e+002	4.260000000000000e+002	3.947059366654310e+001	9.265397574305890e+000

Variancia total debido a la regresión = 4.463364373183883e+003

Índice general de correlación = 9.371647573477278e-001

#### Método de optimización: Levenberg Marquardt

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.339009311947957e+004  
 Función Objetivo Inicial = 7.546478990148341e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 200000  
 Número de iteraciones realizadas = 20  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = 1.000000000000012e+000  
 Corte con el eje Y = -4.164263850541102e-012

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.000000000000000e+002	5.233055436910339e+002	Libre	-1.233055436910339e+002	3.082638592275848e+001
2	-1.400000000000000e+002	-1.569478494710398e+002	Libre	1.694784947103983e+001	-1.210560676502845e+001
3	-1.300000000000000e-001	-1.996645633434003e-001	Libre	6.966456334340027e-002	-5.358812564876943e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	9.739199091936615e+001	1.270000000000000e+002	2.960800908063385e+001	2.331339297687705e+001
2	1	2.376155538759272e+002	1.510000000000000e+002	8.661555387592722e+001	5.736129395756770e+001
3	1	3.316732987215681e+002	3.790000000000000e+002	4.732670127843193e+001	1.248725627399259e+001
4	1	3.947644025197812e+002	4.210000000000000e+002	2.623559748021876e+001	6.231733368222983e+000
5	1	4.370840157000603e+002	4.600000000000000e+002	2.291598429993968e+001	4.981735717378191e+000
6	1	4.654707382633002e+002	4.260000000000000e+002	3.947073826330023e+001	9.265431517206627e+000

Variancia total debido a la regresión = 4.463364373159858e+003

Índice general de correlación = 9.371647573480774e-001

## INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 3

### PARA 18 ITERACIONES

#### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 4.225190734863281e+001  
 Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 18  
 Número de iteraciones realizadas = 18  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = NO EVALUABLE  
 Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-3.500000000000000e+000	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000
2	-1.500000000000000e+001	-2.887695312500000e+001	Libre	1.387695312500000e+001	-9.251302083333334e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	4.225190734863281e+001	0.000000000000000e+000	4.225190734863281e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.785223674597452e+003

Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 3.561947481127920e+001  
 Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 18  
 Número de iteraciones realizadas = 18  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = NO EVALUABLE  
 Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-2.960987090421182e+000	Libre	-5.390129095788181e-001	-1.540036884510909e+001
2	-1.500000000000000e+001	-1.410321867780203e+001	Libre	-8.967813221979704e-001	-5.978542147986468e+000

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	3.561947481127920e+001	0.000000000000000e+000	3.561947481127920e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.268746985831354e+003  
Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 3.592266555977423e-008  
Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
Número máximo de iteraciones permitidas = 18  
Número de iteraciones realizadas = 18  
Tiempo de búsqueda = 0 seg  
Pendiente = NO EVALUABLE  
Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	3.000189532531288e+000	Libre	-6.500189532531287e+000	-1.857197009294654e+002
2	-1.500000000000000e+001	1.500435958457905e+001	Libre	-3.000435958457905e+001	-2.000290638971937e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	3.592266555977423e-008	0.000000000000000e+000	3.592266555977423e-008	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.290437900919390e-015  
Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Levenberg Marquardt

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 4.579649572421524e+001  
Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
Número máximo de iteraciones permitidas = 18  
Número de iteraciones realizadas = 18  
Tiempo de búsqueda = 0 seg  
Pendiente = NO EVALUABLE  
Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-3.276634405577624e+000	Libre	-2.233655944223760e-001	-6.381874126353601e+000
2	-1.500000000000000e+001	-2.195936033247238e+001	Libre	6.959360332472379e+000	-4.639573554981586e+001



Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	4.579649572421524e+001	0.000000000000000e+000	4.579649572421524e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -2.097319020618065e+003  
Índice general de correlación = NO EVALUABLE

## PARA 1210 ITERACIONES

### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 4.224099955863188e+001  
Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
Número máximo de iteraciones permitidas = 1210  
Número de iteraciones realizadas = 1210  
Tiempo de búsqueda = 0 seg  
Pendiente = NO EVALUABLE  
Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-3.499294281005859e+000	Libre	-7.057189941406250e-004	-2.016339983258928e-002
2	-1.500000000000000e+001	-2.885248184204102e+001	Libre	1.385248184204102e+001	-9.234987894694010e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	4.224099955863188e+001	0.000000000000000e+000	4.224099955863188e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.784302043712338e+003  
Índice general de correlación = NO EVALUABLE

### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 3.478876592024662e-028  
Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
Número máximo de iteraciones permitidas = 1210  
Número de iteraciones realizadas = 1210  
Tiempo de búsqueda = 0 seg  
Pendiente = NO EVALUABLE  
Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	3.000000000000019e+000	Libre	-6.500000000000019e+000	-1.857142857142863e+002
2	-1.500000000000000e+001	1.500000000000043e+001	Libre	-3.000000000000043e+001	-2.000000000000029e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	3.478876592024662e-028	0.000000000000000e+000	3.478876592024662e-028	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.210258234253713e-055  
Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 3.592266555977423e-008

Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 1210

Número de iteraciones realizadas = 1210

Tiempo de búsqueda = 1 seg

Pendiente = NO EVALUABLE

Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	3.000189532531288e+000	Libre	-6.500189532531287e+000	-1.857197009294654e+002
2	-1.500000000000000e+001	1.500435958457905e+001	Libre	-3.000435958457905e+001	-2.000290638971937e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	3.592266555977423e-008	0.000000000000000e+000	3.592266555977423e-008	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.290437900919390e-015  
Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Levenberg Marquardt

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 4.579649572421524e+001

Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004

Número máximo de iteraciones permitidas = 1210

Número de iteraciones realizadas = 1210

Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = NO EVALUABLE

Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-3.276634405577624e+000	Libre	-2.233655944223760e-001	-6.381874126353601e+000
2	-1.500000000000000e+001	-2.195936033247238e+001	Libre	6.959360332472379e+000	-4.639573554981586e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	4.579649572421524e+001	0.000000000000000e+000	4.579649572421524e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -2.097319020618065e+003  
 Índice general de correlación = NO EVALUABLE

## PARA UN NÚMERO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 90000

### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 4.155982182504999e+001  
 Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 90000  
 Número de iteraciones realizadas = 90000  
 Tiempo de búsqueda = 1 seg  
 Pendiente = NO EVALUABLE  
 Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-3.446689605712891e+000	Libre	-5.331039428710938e-002	-1.523154122488839e+000
2	-1.500000000000000e+001	-2.715894699096680e+001	Libre	1.215894699096680e+001	-8.105964660644531e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	4.155982182504999e+001	0.000000000000000e+000	4.155982182504999e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.727218790129902e+003  
 Índice general de correlación = NO EVALUABLE

### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 1.841357307187094e-012  
 Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 90000  
 Número de iteraciones realizadas = 629  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg

Pendiente = NO EVALUABLE  
 Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	2.999998643338842e+000	Libre	-6.499998643338842e+000	-1.857142469525384e+002
2	-1.500000000000000e+001	1.499996879552323e+001	Libre	-2.999996879552323e+001	-1.999997919701549e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	1.841357307187094e-012	0.000000000000000e+000	1.841357307187094e-012	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -3.390596732731307e-024  
 Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización  
 Observación: Ninguna  
 Función Objetivo = 3.604356778946243e-008  
 Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 90000  
 Número de iteraciones realizadas = 13  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = NO EVALUABLE  
 Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	3.000189699323957e+000	Libre	-6.500189699323957e+000	-1.857197056949702e+002
2	-1.500000000000000e+001	1.500436374813699e+001	Libre	-3.000436374813699e+001	-2.000290916542466e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	3.604356778946243e-008	0.000000000000000e+000	3.604356778946243e-008	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -1.299138778993574e-015  
 Índice general de correlación = NO EVALUABLE

#### Método de optimización: Levenberg Marquardt

Tipo de búsqueda: Minimización  
 Observación: Ninguna  
 Función Objetivo = 4.579649572421524e+001  
 Función Objetivo Inicial = 9.630006250000000e+004  
 Número máximo de iteraciones permitidas = 90000  
 Número de iteraciones realizadas = 6  
 Tiempo de búsqueda = 0 seg  
 Pendiente = NO EVALUABLE  
 Corte con el eje Y = NO EVALUABLE

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	-3.500000000000000e+000	-3.276634405577624e+000	Libre	-2.233655944223760e-001	-6.381874126353601e+000
2	-1.500000000000000e+001	-2.195936033247238e+001	Libre	6.959360332472379e+000	-4.639573554981586e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	4.579649572421524e+001	0.000000000000000e+000	4.579649572421524e+001	NO EVALUABLE

Variancia total debido a la regresión = -2.097319020618065e+003  
 Índice general de correlación = NO EVALUABLE

## INFORME DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN DEL PROBLEMA 4

### PARA UN NÚMERO DE ITERACIONES MENOR O IGUAL A 4000

#### Método de optimización: Búsqueda directa

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 8.054732438069651e+000

Función Objetivo Inicial = 6.909534187039752e+001

Número máximo de iteraciones permitidas = 4000

Número de iteraciones realizadas = 4000

Tiempo de búsqueda = 188 seg

Pendiente = 1.025923764024419e+000

Corte con el eje Y = 8.529751975686344e-006

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
1	4.285820000000000e-001	3.895195000000000e-001	Libre	3.906250000000000e-002	9.114358512490025e+000
2	4.235000000000000e-002	4.235000000000000e-002	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000
3	4.439400000000000e-002	4.439400000000000e-002	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000
4	3.622700000000000e-001	3.232075000000000e-001	Libre	3.906250000000000e-002	1.078270350843294e+001
5	2.600450000000000e+000	1.975450000000000e+000	Libre	6.250000000000000e-001	2.403430175546540e+001
6	1.220000000000000e-003	1.220000000000000e-003	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000
7	3.500000000000000e-002	3.500000000000000e-002	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000
8	3.079900000000000e-002	3.079900000000000e-002	Libre	0.000000000000000e+000	0.000000000000000e+000
9	1.293740000000000e-001	9.031149999999999e-002	Libre	3.906250000000000e-002	3.019347009445484e+001
10	1.250000000000000e+002	3.341015625000000e+002	Libre	-2.091015625000000e+002	1.672812500000000e+002
11	2.750000000000000e+001	1.027343750000000e+002	Libre	-7.523437500000000e+001	2.735795454545454e+002
12	5.100000000000000e+001	3.213281250000000e+001	Libre	1.886718750000000e+001	3.699448529411765e+001
13	5.500000000000000e+001	1.601953125000000e+002	Libre	-1.051953125000000e+002	1.912642045454545e+002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
14	8.800000000000000e+001	3.741406250000000e+001	Libre	5.058593750000000e+001	5.748401988636363e+001
1	1	1.041538691245141e-003	1.055214200000000e-003	1.367550875485887e-005	1.295993624314274e+000
1	2	5.216171964052599e-005	5.752921100000000e-005	5.367491359474014e-006	9.330027765327799e+000
1	3	3.847585308402219e-006	7.105364100000000e-006	3.257778791597782e-006	4.584956866035594e+001
1	4	3.029761916785165e-004	6.728360900000000e-004	3.698598983214835e-004	5.497028233451084e+001
1	5	5.486631002279344e-004	5.728699000000000e-004	2.420679977206566e-005	4.225531795625090e+000
2	1	9.396884084798956e-004	1.018225400000000e-003	7.853699152010434e-005	7.713124375025839e+000
2	2	3.894724002404656e-005	4.647568900000000e-005	7.528448975953448e-006	1.619868180104538e+001
2	3	3.872682012527917e-006	3.507873300000000e-006	3.648087125279172e-007	1.039971177202772e+001
2	4	2.812681560682682e-004	5.539080600000000e-004	2.726399039317317e-004	4.922114762723109e+001
2	5	5.462454756078548e-004	7.347005900000001e-004	1.884551143921453e-004	2.565060066062357e+001
3	1	2.025402679726765e-003	2.460149600000000e-003	4.347469202732345e-004	1.767156437450936e+001
3	2	8.166804416803023e-005	7.472671900000000e-005	6.941325168030224e-006	9.288946792953968e+000
3	3	8.416772574692125e-006	7.809498999999999e-006	6.072735746921252e-007	7.776088769486048e+000
3	4	5.639801303536738e-004	6.449878000000000e-004	8.100766964632626e-005	1.255956618812422e+001
3	5	1.118503389707480e-003	1.038409900000000e-003	8.009348970748034e-005	7.713089956815737e+000
4	1	8.288214043007677e-004	8.415594300000000e-004	1.273802569923233e-005	1.513621646332492e+000
4	2	2.921752025877947e-005	3.298153000000000e-005	3.764009741220525e-006	1.141247765407040e+001
4	3	4.034727596737435e-006	3.584688100000000e-006	4.500394967374346e-007	1.255449523592958e+001
4	4	2.578741669538772e-004	3.701415800000000e-004	1.122674130461228e-004	3.033093797409164e+001
4	5	5.301921165566941e-004	6.293081100000000e-004	9.911599344330591e-005	1.574999461604045e+001
5	1	1.693730778330804e-003	1.963510600000000e-003	2.697798216691966e-004	1.373966718943084e+001
5	2	5.929107041465987e-005	5.427817800000000e-005	5.012892414659876e-006	9.235557639130548e+000
5	3	8.275230280583454e-006	7.374215800000000e-006	9.010144805834536e-007	1.221844471358505e+001
5	4	5.156968920099394e-004	4.958356700000000e-004	1.986122200993944e-005	4.005605730208848e+000
5	5	1.066858304169846e-003	1.247312200000000e-003	1.804538958301539e-004	1.446742009179048e+001
6	1	1.632094504961164e-003	1.887459200000000e-003	2.553646950388365e-004	1.352954781956805e+001
6	2	5.782773367893454e-005	5.145118800000000e-005	6.376545678934541e-006	1.239338862094796e+001
6	3	7.924625804046795e-006	6.990142100000000e-006	9.344837040467946e-007	1.336859380937041e+001
6	4	5.157863706392804e-004	4.959210600000000e-004	1.986531063928045e-005	4.005740477986649e+000
6	5	1.055633131773881e-003	1.247527100000000e-003	1.918939682261193e-004	1.538194787320607e+001
7	1	6.954183365904747e-004	7.976761600000000e-004	1.022578234095253e-004	1.281946591076826e+001
7	2	2.253360415574727e-005	2.810026100000000e-005	5.566656844252729e-006	1.980998270533049e+001
7	3	4.294683956069968e-006	5.453846800000000e-006	1.159162843930032e-006	2.125404116466990e+001
7	4	2.324700629330416e-004	2.732818200000000e-004	4.081175706695836e-005	1.493394513654745e+001
7	5	4.954578635054599e-004	7.124596700000000e-004	2.170018064945401e-004	3.045811793031598e+001
8	1	1.368746897083087e-003	1.640099800000000e-003	2.713529029169126e-004	1.654490189663535e+001
8	2	4.450922831667655e-005	4.485487800000000e-005	3.456496833234536e-007	7.705955265856559e-001
8	3	8.421162567867789e-006	8.961720600000000e-006	5.405580321322114e-007	6.031855446734318e+000
8	4	4.652121658551781e-004	4.400458400000000e-004	2.516632585517810e-005	5.719023694253784e+000
8	5	9.869133361713133e-004	1.273013900000000e-003	2.861005638286867e-004	2.247426864928079e+001
9	1	1.086650446420440e-003	1.310735600000000e-003	2.240851535795603e-004	1.709613697679076e+001
9	2	2.833070568752570e-005	3.745759400000000e-005	9.126888312474306e-006	2.436592246814973e+001
9	3	9.020562321094162e-006	1.152221200000000e-005	2.501649678905839e-006	2.171154010103129e+001
9	4	3.972272819407847e-004	3.915693700000000e-004	5.657911940784664e-006	1.444932207231803e+000

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
9	5	8.932721866596149e-004	9.904946200000001e-004	9.722243334038517e-005	9.815543807838671e+000
10	1	4.137851562252500e-003	5.745342900000000e-003	1.607491337747500e-003	2.797903216094378e+001
10	2	1.094149676611648e-004	9.918959400000000e-005	1.022537366116483e-005	1.030891774913891e+001
10	3	3.386043884625311e-005	3.191653000000000e-005	1.943908846253110e-006	6.090602099454764e+000
10	4	1.596224717461868e-003	1.422513400000000e-003	1.737113174618682e-004	1.221157687947743e+001
10	5	3.533787393911560e-003	3.415213000000000e-003	1.185743939115603e-004	3.471947252237569e+000
11	1	2.412214925721134e-003	2.923948700000000e-003	5.117337742788657e-004	1.750146212479261e+001
11	2	6.318396959892709e-005	6.831888500000001e-005	5.134915401072918e-006	7.516099539787451e+000
11	3	2.223355744753650e-005	5.569069600000000e-005	3.345713855246350e-005	6.007671111250522e+001
11	4	9.473719866755757e-004	1.072957200000000e-003	1.255852133244244e-004	1.170458740799954e+001
11	5	2.118882273014992e-003	1.970974500000000e-003	1.479077730149919e-004	7.504296631691172e+000
12	1	3.014583786034913e-003	3.749759900000000e-003	7.351761139650867e-004	1.960595167613496e+001
12	2	6.712876639359789e-005	6.824349099999999e-005	1.114724606402105e-006	1.633451908845205e+000
12	3	3.448426244348826e-005	2.908718300000000e-005	5.397079443488259e-006	1.855483717171326e+001
12	4	1.324968685480111e-003	1.142814900000000e-003	1.821537854801106e-004	1.593904537647441e+001
12	5	3.011305255729888e-003	2.999830300000000e-003	1.147495572988806e-005	3.825201622201115e-001
13	1	1.742906795194049e-003	2.160169000000000e-003	4.172622048059511e-004	1.931618335444825e+001
13	2	3.799235892584110e-005	5.013192300000000e-005	1.253956407415890e-005	2.421523721353937e+001
13	3	2.296550966440112e-005	4.864934100000000e-005	2.568383133559888e-005	5.279379084620874e+001
13	4	7.700141552464536e-004	7.262153700000000e-004	4.379878524645353e-005	6.031101386143002e+000
13	5	1.772730208802520e-003	1.796402300000000e-003	2.367209119748053e-005	1.317749993833816e+000
14	1	1.765382160720527e-003	2.189360600000000e-003	4.239784392794737e-004	1.936540007523081e+001
14	2	3.830616963553684e-005	5.013192300000000e-005	1.182575336446316e-005	2.358926739048722e+001
14	3	2.336276505387445e-005	5.837921000000000e-005	3.501644494612555e-005	5.998101883551619e+001
14	4	7.684590920048756e-004	7.229546300000000e-004	4.550446200487558e-005	6.294234813168783e+000
14	5	1.776817766977437e-003	1.788336300000000e-003	1.151853302256280e-005	6.440921107826751e-001
15	1	2.038781558189374e-003	2.468023900000000e-003	4.292423418106256e-004	1.739214688361104e+001
15	2	4.044352252850924e-005	4.415755800000000e-005	3.714035471490761e-006	8.410871523943332e+000
15	3	3.468351569815220e-005	2.817820900000000e-005	6.505306698152199e-006	2.308630295897159e+001
15	4	1.040651271340942e-003	9.770368900000001e-004	6.361438134094215e-005	6.510949790334133e+000
15	5	2.376488670964016e-003	2.302252500000000e-003	7.423617096401604e-005	3.224501698402587e+000
16	1	9.118200536898553e-004	6.875263600000000e-004	2.242936936898553e-004	3.262328642786224e+001
16	2	2.867574029924036e-005	3.200150600000000e-005	3.325765700759643e-006	1.039252871649116e+001
16	3	3.908731860789279e-006	3.623095400000000e-006	2.856364607892793e-007	7.883768690972898e+000
16	4	1.991621055644592e-004	3.215564100000000e-004	1.223943044355409e-004	3.806308959461914e+001
16	5	4.122152699821893e-004	3.484490200000000e-004	6.376624998218929e-005	1.830002276435999e+001
17	1	9.118200536898553e-004	6.875263600000000e-004	2.242936936898553e-004	3.262328642786224e+001
17	2	2.867574029924036e-005	3.200150600000000e-005	3.325765700759643e-006	1.039252871649116e+001
17	3	3.908731860789279e-006	3.623095400000000e-006	2.856364607892793e-007	7.883768690972898e+000
17	4	1.991621055644592e-004	3.215564100000000e-004	1.223943044355409e-004	3.806308959461914e+001
17	5	4.122152699821893e-004	3.484490200000000e-004	6.376624998218929e-005	1.830002276435999e+001
18	1	1.051405039388375e-003	8.131362300000000e-004	2.382688093883746e-004	2.930244657631042e+001
18	2	4.181605542038336e-005	4.372408500000000e-005	1.908028579616645e-006	4.363795330689356e+000
18	3	4.388567004300389e-006	3.712712900000000e-006	6.758541043003894e-007	1.820378042967958e+001
18	4	2.823525781659885e-004	4.963713600000000e-004	2.140187818340114e-004	4.311666608524945e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
18	5	5.654665377533953e-004	5.520390700000000e-004	1.342746775339536e-005	2.432340115600036e+000
19	1	9.785312494114279e-004	8.493566400000001e-004	1.291746094114278e-004	1.520852411437295e+001
19	2	5.263479558621783e-005	5.402374500000000e-005	1.388949413782171e-006	2.570998019078780e+000
19	3	3.956219042091533e-006	6.990142100000000e-006	3.033923057908467e-006	4.340288100736132e+001
19	4	3.940853303852932e-004	4.740973500000000e-004	8.001201961470680e-005	1.687670678072906e+001
19	5	7.092123324445548e-004	7.030227000000000e-004	6.189632444554821e-006	8.804313778992940e-001
20	1	1.004280220267306e-003	9.396389400000000e-004	6.464128026730551e-005	6.879374354931002e+000
20	2	6.174383876332836e-005	4.783264000000000e-005	1.391119876332836e-005	2.908306705071758e+001
20	3	4.038355875202201e-006	7.220585800000000e-006	3.182229924797800e-006	4.407163093052367e+001
20	4	4.767300277229134e-004	5.689075300000000e-004	9.217750227708655e-005	1.620254565396358e+001
20	5	8.148916509544548e-004	7.964549000000000e-004	1.843675095445480e-005	2.314851845905499e+000
21	1	1.011887046615826e-003	9.342231800000000e-004	7.766386661582571e-005	8.313202699147940e+000
21	2	6.786168119303371e-005	5.846211600000000e-005	9.399565193033708e-006	1.607804478550470e+001
21	3	4.057893113724022e-006	3.610292900000000e-006	4.2766096213724022e-007	1.239789197502569e+001
21	4	5.432668570964504e-004	4.577974900000000e-004	8.546936709645037e-005	1.866968888283996e+001
21	5	8.872417580475285e-004	6.788522000000000e-004	2.083895580475285e-004	3.069733854402010e+001
22	1	9.679411734346173e-004	9.262530900000000e-004	4.168808343461730e-005	4.500722738168387e+000
22	2	7.292872103599671e-005	5.390124000000000e-005	1.902748103599671e-005	3.530063693524808e+001
22	3	3.868299047486685e-006	3.328639000000000e-006	5.396600474866854e-007	1.621263367660733e+001
22	4	6.469706796329662e-004	5.984871500000000e-004	4.848352963296616e-005	8.101014304645664e+000
22	5	9.562359392078859e-004	9.786008200000000e-004	2.236488079211414e-005	2.285393628845941e+000
23	1	9.851273903488237e-004	9.933550600000000e-004	8.227669651176281e-006	8.282707747193920e+001
23	2	7.862639882454208e-005	6.313607400000000e-005	1.549032482454208e-005	2.453482429797912e+001
23	3	3.933297404516446e-006	3.431058800000000e-006	5.022386045164456e-007	1.463800633543341e+001
23	4	7.321233917906920e-004	6.264597200000001e-004	1.056636717906920e-004	1.686679421155633e+001
23	5	1.024155911783003e-003	1.066767700000000e-003	4.261178821699657e-005	3.994476793494645e+000
24	1	9.851273903488237e-004	9.135779100000000e-004	7.154948034882372e-005	7.831787477088158e+000
24	2	7.862639882454208e-005	6.061063000000000e-005	1.801576882454208e-005	2.972377753628708e+001
24	3	3.933297404516446e-006	3.431058800000000e-006	5.022386045164456e-007	1.463800633543341e+001
24	4	7.321233917906920e-004	6.264597200000001e-004	1.056636717906920e-004	1.686679421155633e+001
24	5	1.024155911783003e-003	1.066767700000000e-003	4.261178821699657e-005	3.994476793494645e+000
25	1	1.026297692571876e-003	9.679277400000000e-004	5.836995257187594e-005	6.030403940264790e+000
25	2	8.315858660704107e-005	6.860157700000000e-005	1.455700960704106e-005	2.121964281818341e+001
25	3	4.097265446291688e-006	7.169376200000000e-006	3.072110753708312e-006	4.285046101651510e+001
25	4	7.714802842511750e-004	7.369059600000000e-004	3.457432425117495e-005	4.691823126410180e+000
25	5	1.072935949977419e-003	1.304012100000000e-003	2.310761500225811e-004	1.772039922195362e+001
26	1	2.879172009234706e-004	2.238909200000000e-004	6.402628092347062e-005	2.859708688653859e+001
26	2	2.356841112355309e-005	1.767810000000000e-005	5.890311123553095e-006	3.331982013651408e+001
26	3	1.122359872323080e-006	8.577646900000000e-007	2.645951823230804e-007	3.084705927019219e+001
26	4	4.285997140610251e-004	3.074420400000000e-004	1.211576740610251e-004	3.940829759684950e+001
26	5	3.633239974043332e-004	3.374808900000000e-004	2.584310740433315e-005	7.657650601885384e+000
27	1	5.407777743187259e-004	4.476665900000000e-004	9.311118431872586e-005	2.079922567344725e+001
27	2	3.906841133501280e-005	2.638522300000000e-005	1.268318833501280e-005	4.806928611144502e+001
27	3	2.120882504426069e-006	3.584688100000000e-006	1.463805595573931e-006	4.083495006368703e+001
27	4	4.495766937927353e-004	4.299840900000000e-004	1.959260379273534e-005	4.556588080441615e+000



Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
27	5	5.681585331335197e-004	4.867459100000000e-004	8.141262313351966e-005	1.672589773451197e+001
28	1	1.029014280803976e-003	9.106011700000000e-004	1.184131108039764e-004	1.300383907962433e+001
28	2	6.280643579785544e-005	5.465510900000000e-005	8.151326797855436e-006	1.491411680810194e+001
28	3	4.142178829480934e-006	7.425425800000000e-006	3.283246970519065e-006	4.421627875561110e+001
28	4	4.773839296908898e-004	5.486132600000000e-004	7.122933030911022e-005	1.298352327632588e+001
28	5	8.239330513996198e-004	7.527699300000000e-004	7.116312139961980e-005	9.453502134393148e+000
29	1	1.902370944692113e-003	1.733973500000000e-003	1.683974446921128e-004	9.711650419808194e+000
29	2	9.629676177932164e-005	8.955898400000000e-005	6.737777779321647e-006	7.523285189704304e+000
29	3	8.148727772802313e-006	7.604659900000000e-006	5.440678728023129e-007	7.154401116640507e+000
29	4	5.125806387664044e-004	5.859876400000000e-004	5.440678728023129e-007	1.252705624193637e+001
29	5	1.066395792343786e-003	9.978497400000000e-004	6.854605234378605e-005	6.869376179201696e+000
30	1	1.902370944692113e-003	1.733973500000000e-003	1.683974446921128e-004	9.711650419808194e+000
30	2	9.629676177932164e-005	8.955898400000000e-005	6.737777779321647e-006	7.523285189704304e+000
30	3	8.148727772802313e-006	7.604659900000000e-006	5.440678728023129e-007	7.154401116640507e+000
30	4	5.125806387664044e-004	5.859876400000000e-004	7.340700123359563e-005	1.252705624193637e+001
30	5	1.066395792343786e-003	9.978497400000000e-004	6.854605234378605e-005	6.869376179201696e+000
31	1	2.570187187114049e-003	2.469598500000000e-003	1.005886871140484e-004	4.073078563744202e+000
31	2	1.187718760050237e-004	1.355258100000000e-004	1.675393399497630e-005	1.236217219065232e+001
31	3	1.162217888987239e-005	1.083088000000000e-005	7.912988898723889e-007	7.305951962097160e+000
31	4	5.385465967034064e-004	5.434581500000000e-004	4.911553296593567e-006	9.037592492804768e-001
31	5	1.173191495441853e-003	1.132748300000000e-003	4.044319544185306e-005	3.570360285851063e+000
32	1	3.255480614293245e-003	3.108891700000000e-003	1.465889142932444e-004	4.715150234832703e+000
32	2	1.404014759660342e-004	1.611383300000000e-004	2.073685403396577e-005	1.286897663266447e+001
32	3	1.551618607800577e-005	1.459480200000000e-005	9.213840780057719e-007	6.313097485020845e+000
32	4	5.614775398428756e-004	5.261917200000000e-004	3.528581984287558e-005	6.705886562197440e+000
32	5	1.235395571801548e-003	1.174761600000000e-003	6.063397180154770e-005	5.161385237783367e+000
33	1	3.255480614293245e-003	3.054157800000000e-003	2.013228142932447e-004	6.591762033161635e+000
33	2	1.404014759660342e-004	1.718808800000000e-004	3.147940403396576e-005	1.831466305848898e+001
33	3	1.551618607800577e-005	1.459480200000000e-005	9.213840780057719e-007	6.313097485020845e+000
33	4	5.614775398428756e-004	5.261917200000000e-004	3.528581984287558e-005	6.705886562197440e+000
33	5	1.235395571801548e-003	1.174761600000000e-003	6.063397180154770e-005	5.161385237783367e+000
34	1	4.532223067709703e-003	4.031073800000000e-003	5.011492677097027e-004	1.243215313273855e+001
34	2	1.789712213908290e-004	2.535808600000000e-004	7.460963860917097e-005	2.942242510305036e+001
34	3	2.361283673730558e-005	2.296761000000000e-005	6.452267373055782e-007	2.809289853430889e+000
34	4	6.006208559939260e-004	5.547155200000000e-004	4.590533599392599e-005	8.275473524506037e+000
34	5	1.279229252510388e-003	1.596370500000000e-003	3.171412474896119e-004	1.986639364042445e+001
35	1	5.068155756052624e-003	4.551334800000000e-003	5.168209560526237e-004	1.135537108921593e+001
35	2	1.953453955948666e-004	3.344892500000000e-004	1.391438544051334e-004	4.159890173006560e+001
35	3	2.741326560315095e-005	2.138522400000000e-004	1.864389743968491e-004	8.718121184835336e+001
35	4	6.196566194871453e-004	5.965035500000000e-004	2.315306948714525e-005	3.881463821488614e+000
35	5	1.289485798515587e-003	1.611549400000000e-003	3.220636014844131e-004	1.998471790467069e+001

```

Resp.  Variancia debido a la regresión
=====
1          2.505156853648937e-007
2          1.390062902472099e-009
3          1.805119756636214e-009
4          2.288065466595458e-008
5          3.081377301535262e-008

```

Variancia total debido a la regresión = 6.148105914106185e-008

```

Resp.  Índice de correlación
=====
1          9.999800623116024e-001
2          9.999374295815580e-001
3          9.987027829730937e-001
4          9.999832484928597e-001
5          9.999941243575788e-001

```

Índice general de correlación = 9.788600740554021e-001

#### Método de optimización: Simplex flexible

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 6.431333086353141e+000

Función Objetivo Inicial = 6.909534187039752e+001

Número máximo de iteraciones permitidas = 4000

Número de iteraciones realizadas = 3126

Tiempo de búsqueda = 94 seg

Pendiente = 9.711825187001179e-001

Corte con el eje Y = 3.607726733791458e-005

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
	=====	=====	=====	=====	=====
1	4.285820000000000e-001	3.247658458925119e-001	Libre	1.038161541074881e-001	2.422317178684315e+001
2	4.235000000000000e-002	1.443714956576535e-002	Libre	2.791285043423464e-002	6.590991838071935e+001
3	4.439400000000000e-002	4.576400144920235e-002	Libre	-1.370001449202352e-003	3.086005877376113e+000
4	3.622700000000000e-001	3.454209615190657e-001	Libre	1.684903848093428e-002	4.650961570357545e+000
5	2.600450000000000e+000	2.638255865902226e+000	Libre	-3.780586590222557e-002	1.453820142753199e+000
6	1.220000000000000e-003	1.189915483786463e-003	Libre	3.008451621353664e-005	2.465943951929233e+000
7	3.500000000000000e-002	2.234780944439833e-002	Libre	1.265219055560168e-002	3.614911587314764e+001
8	3.079900000000000e-002	2.957502082680946e-002	Libre	1.223979173190538e-003	3.974087383325882e+000
9	1.293740000000000e-001	1.082634060910728e-001	Libre	2.111059390892722e-002	1.631749339815359e+001
10	1.250000000000000e+002	1.250037944014627e+002	Libre	-3.794401462727137e-003	3.035521170181710e-003
11	2.750000000000000e+001	2.750051844029173e+001	Libre	-5.184402917279840e-004	1.885237424465396e-003
12	5.100000000000000e+001	5.101391397640868e+001	Libre	-1.391397640868064e-002	2.728230668368753e-002
13	5.500000000000000e+001	5.482866151506701e+001	Libre	1.713384849329884e-001	3.115245180599789e-001
14	8.800000000000000e+001	8.806313291059053e+001	Libre	-6.313291059052517e-002	7.174194385286951e-002

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	9.179097997137730e-004	1.055214200000000e-003	1.373044002862269e-004	1.301199323191698e+001
1	2	4.979388329419721e-005	5.752921100000000e-005	7.735327705802794e-006	1.344591307849293e+001
1	3	3.763753644247295e-006	7.105364100000000e-006	3.341610455752706e-006	4.702940494988435e+001
1	4	3.257748346068670e-004	6.728360900000000e-004	3.470612553931329e-004	5.158184297057147e+001
1	5	5.073804508757230e-004	5.728699000000000e-004	6.548944912427700e-005	1.143181883430723e+001
2	1	8.622811740639955e-004	1.018225400000000e-003	1.559442259360044e-004	1.531529521223929e+001
2	2	4.063295476445912e-005	4.647568900000000e-005	5.842734235540886e-006	1.257159250622597e+001
2	3	3.814123823140884e-006	3.507873300000000e-006	3.062505231408837e-007	8.730375841706819e+000
2	4	3.040529883297056e-004	5.539080600000000e-004	2.498550716702944e-004	4.510767936294236e+001
2	5	5.515015095284051e-004	7.347005900000001e-004	1.831990804715950e-004	2.493520257981486e+001
3	1	1.873335601895800e-003	2.460149600000000e-003	5.868139981042000e-004	2.385277700608939e+001
3	2	8.595980391994080e-005	7.472671900000000e-005	1.123308491994080e-005	1.503222016202905e+001
3	3	8.290907905232149e-006	7.809498999999999e-006	4.814089052321495e-007	6.164401906346996e+000
3	4	6.109753118258400e-004	6.449878000000000e-004	3.401248817415999e-005	5.273353724544866e+000
3	5	1.125788041749130e-003	1.038409900000000e-003	8.737814174913016e-005	8.414609851960210e+000
4	1	8.082535400284661e-004	8.415594300000000e-004	3.330588997153394e-005	3.957639684642823e+000
4	2	3.178510732343471e-005	3.298153000000000e-005	1.196422676565284e-006	3.627553593072499e+000
4	3	4.010209042610939e-006	3.584688100000000e-006	4.255209426109390e-007	1.187051511150828e+001
4	4	2.765854605338194e-004	3.701415800000000e-004	9.355611946618061e-005	2.527576595587575e+001
4	5	5.711862280967626e-004	6.293081100000000e-004	5.812188190323735e-005	9.235838690087334e+000
5	1	1.656906183980328e-003	1.963510600000000e-003	3.066044160196725e-004	1.561511386898917e+001
5	2	6.454236403771328e-005	5.427817800000000e-005	1.026418603771329e-005	1.891033637443262e+001
5	3	8.223568500251768e-006	7.374215800000000e-006	8.493527002517677e-007	1.151787150373017e+001
5	4	5.533076030672658e-004	4.958356700000000e-004	5.747193306726583e-005	1.159092347415543e+001
5	5	1.146776717953340e-003	1.247312200000000e-003	1.005354820466603e-004	8.060169863379858e+000
6	1	1.587995543330577e-003	1.887459200000000e-003	2.994636566694235e-004	1.586596715147133e+001
6	2	6.287744830175626e-005	5.145118800000000e-005	1.142626030175626e-005	2.220796204308492e+001
6	3	7.877366539686296e-006	6.990142100000000e-006	8.872244396862957e-007	1.269250935093717e+001
6	4	5.530645594506195e-004	4.959210600000000e-004	5.714349945061959e-005	1.152270069970805e+001
6	5	1.139061583115013e-003	1.247527100000000e-003	1.084655168849869e-004	8.694441738779617e+000
7	1	7.292394146626319e-004	7.976761600000000e-004	6.843674533736806e-005	8.579514942175038e+000
7	2	2.383893851478404e-005	2.810026100000000e-005	4.261322485215962e-006	1.516470784814405e+001
7	3	4.288457099162327e-006	5.453846800000000e-006	1.165389700837673e-006	2.136821483210113e+001
7	4	2.432082648222870e-004	2.732818200000000e-004	3.007355517771295e-005	1.100459415035839e+001
7	5	5.477785237288657e-004	7.124596700000000e-004	1.646811462711343e-004	2.311445169536885e+001
8	1	1.431422056237562e-003	1.640099800000000e-003	2.086777437624381e-004	1.272347839823151e+001
8	2	4.714762108681116e-005	4.485487800000000e-005	2.292743086811157e-006	5.111468783420071e+000
8	3	8.412824990898431e-006	8.961720600000000e-006	5.488956091015690e-007	6.124890895410966e+000
8	4	4.867473736117202e-004	4.400458400000000e-004	4.670153361172020e-005	1.061287924269894e+001
8	5	1.094378126154265e-003	1.273013900000000e-003	1.786357738457350e-004	1.403250772405038e+001
9	1	1.230031084384302e-003	1.310735600000000e-003	8.070451561569794e-005	6.157192618839219e+000
9	2	3.147668983062244e-005	3.745759400000000e-005	5.980904169377567e-006	1.596713384574985e+001
9	3	9.175913093985695e-006	1.152221200000000e-005	2.046298906014306e-006	2.036326797332236e+001
9	4	3.967181458726635e-004	3.915693700000000e-004	5.148775872663438e-006	1.314907719330406e+000
9	5	9.742085294408866e-004	9.904946200000001e-004	1.628609055911350e-005	1.644238164475189e+000

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
10	1	4.644190195535690e-003	5.745342900000000e-003	1.101152704464311e-003	1.916600494749079e+001
10	2	1.220589988401668e-004	9.918959400000000e-005	2.286940484016675e-005	2.305625410682369e+001
10	3	3.454491024507598e-005	3.191653000000000e-005	2.628380245075982e-006	8.235169189996475e+000
10	4	1.595126674785706e-003	1.422513400000000e-003	1.726132747857064e-004	1.213438655732216e+001
10	5	3.903857584135206e-003	3.415213000000000e-003	4.886445841352058e-004	1.430788018595636e+001
11	1	2.769640295913071e-003	2.923948700000000e-003	1.543084040869286e-004	5.277397790423907e+000
11	2	6.850135219030265e-005	6.831888500000001e-005	1.824671903026450e-007	2.670816280193171e-001
11	3	2.260163723964484e-005	5.569069600000000e-005	3.308905876035516e-005	5.941577523174635e+001
11	4	9.319106633976900e-004	1.072957200000000e-003	1.410465366023101e-004	1.314558834241572e+001
11	5	2.300221810247353e-003	1.970974500000000e-003	3.292473102473534e-004	1.670479807056628e+001
12	1	3.578811406045618e-003	3.749759900000000e-003	1.709484939543824e-004	4.558918397798813e+000
12	2	7.614300470571692e-005	6.824349099999999e-005	7.899513705716922e-006	1.157548300938609e+001
12	3	3.573583383653025e-005	2.908718300000000e-005	6.648650836530250e-006	2.285766496030313e+001
12	4	1.251596741596259e-003	1.142814900000000e-003	1.087818415962593e-004	9.518762976949228e+000
12	5	3.178725792406597e-003	2.999830300000000e-003	1.788954924065969e-004	5.963520416691469e+000
13	1	2.108329900070026e-003	2.160169000000000e-003	5.183909992997416e-005	2.399770570264371e+000
13	2	4.182143880974422e-005	5.013192300000000e-005	8.310484190255781e-006	1.657723002218722e+001
13	3	2.361866893199855e-005	4.864934100000000e-005	2.503673102473534e-005	5.145120479227345e+001
13	4	7.149553184474232e-004	7.262153700000000e-004	1.126005155257679e-005	1.550511324564336e+000
13	5	1.810758684705286e-003	1.796402300000000e-003	1.435638470528595e-005	7.991742554151677e-001
14	1	2.139800417537272e-003	2.189360600000000e-003	4.956018246272780e-005	2.263682942989282e+000
14	2	4.212327499472741e-005	5.013192300000000e-005	8.008648005272592e-006	1.597514622623312e+001
14	3	2.399657392204132e-005	5.837921000000000e-005	3.438263607795868e-005	5.889534318460061e+001
14	4	7.134434970356013e-004	7.229546300000000e-004	9.511132964398739e-006	1.315591956911423e+000
14	5	1.807203106274419e-003	1.788336300000000e-003	1.886680627441895e-005	1.054992076961081e+000
15	1	2.507502607978405e-003	2.468023900000000e-003	3.947870797840498e-005	1.599608009404000e+000
15	2	4.427017046406166e-005	4.415755800000000e-005	1.126124640616664e-007	2.550242113969854e-001
15	3	3.592138618247105e-005	2.817820900000000e-005	7.743177182471051e-006	2.747930921539779e+001
15	4	9.318682764389805e-004	9.770368900000001e-004	4.516861356101954e-005	4.623020279307932e+000
15	5	2.337676985054493e-003	2.302252500000000e-003	3.542448505449315e-005	1.538688091531800e+000
16	1	8.702605628341430e-004	6.875263600000000e-004	1.827342028341430e-004	2.657850134417290e+001
16	2	3.158219488369677e-005	3.200150600000000e-005	4.193111163032289e-007	1.310285573132805e+000
16	3	3.852506610321825e-006	3.623095400000000e-006	2.294112103218252e-007	6.331911942529175e+000
16	4	2.212974603965709e-004	3.215564100000000e-004	1.002589496034291e-004	3.117927258966136e+001
16	5	4.061217070246463e-004	3.484490200000000e-004	5.767268702464625e-005	1.655125533848431e+001
17	1	8.702605628341430e-004	6.875263600000000e-004	1.827342028341430e-004	2.657850134417290e+001
17	2	3.158219488369677e-005	3.200150600000000e-005	4.193111163032289e-007	1.310285573132805e+000
17	3	3.852506610321825e-006	3.623095400000000e-006	2.294112103218252e-007	6.331911942529175e+000
17	4	2.212974603965709e-004	3.215564100000000e-004	1.002589496034291e-004	3.117927258966136e+001
17	5	4.061217070246463e-004	3.484490200000000e-004	5.767268702464625e-005	1.655125533848431e+001
18	1	9.764321206341328e-004	8.131362300000000e-004	1.632958906341329e-004	2.008223033354853e+001
18	2	4.419810950002205e-005	4.372408500000000e-005	4.740245000220427e-007	1.084126746213312e+000
18	3	4.323185817695910e-006	3.712712900000000e-006	6.104729176959098e-007	1.644277201439168e+001
18	4	3.061975973501043e-004	4.963713600000000e-004	1.901737626498957e-004	3.831279924165966e+001
18	5	5.682088166628872e-004	5.520390700000000e-004	1.616974666288724e-005	2.929094613337285e+000

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
19	1	8.730339504215528e-004	8.493566400000001e-004	2.367731042155277e-005	2.787675907443636e+000
19	2	4.981939717782603e-005	5.402374500000000e-005	4.204347822173965e-006	7.782407202932647e+000
19	3	3.878541759294646e-006	6.990142100000000e-006	3.111600340705354e-006	4.451412140398911e+001
19	4	4.080256699213540e-004	4.740973500000000e-004	6.607168007864603e-005	1.393631077639351e+001
19	5	7.019323549831769e-004	7.030227000000000e-004	1.090345016823086e-006	1.550938564036532e-001
20	1	8.858154504545199e-004	9.396389400000000e-004	5.382348954548004e-005	5.728103344193042e+000
20	2	5.478975385303545e-005	4.783264000000000e-005	6.957113853035447e-006	1.454469971349156e+001
20	3	3.944022876086526e-006	7.220585800000000e-006	3.276562923913475e-006	4.537807616541964e+001
20	4	4.799829707606334e-004	5.689075300000000e-004	8.892455923936656e-005	1.563075799671110e+001
20	5	7.860820726574728e-004	7.964549000000000e-004	1.037282734252720e-005	1.302374728628978e+000
21	1	8.864210640496585e-004	9.342231800000000e-004	4.780211595034156e-005	5.116776908740539e+000
21	2	5.744541862173526e-005	5.846211600000000e-005	1.016697378264740e-006	1.739070440530650e+000
21	3	3.951225351990795e-006	3.610292900000000e-006	3.409324519907944e-007	9.443346050698391e+000
21	4	5.362108309941080e-004	4.577974900000000e-004	7.841133409941080e-005	1.712839032693429e+001
21	5	8.376763477956887e-004	6.788522000000000e-004	1.588241477956887e-004	2.339598336658387e+001
22	1	8.396560906479601e-004	9.262530900000000e-004	8.659699935203991e-005	9.349172519579925e+000
22	2	5.756747268100836e-005	5.390124000000000e-005	3.666232681008360e-006	6.801759441913322e+000
22	3	3.748846370081365e-006	3.328639000000000e-006	4.202073700813648e-007	1.262399948090991e+001
22	4	6.214921750613428e-004	5.984871500000000e-004	2.300502506134275e-005	3.843862823344284e+000
22	5	8.747056334699891e-004	9.786008200000000e-004	1.038951865300110e-004	1.061670748753419e+001
23	1	8.518970319394060e-004	9.933550600000000e-004	1.414580280605940e-004	1.424042960636794e+001
23	2	5.982474125959332e-005	6.313607400000000e-005	3.311332740406682e-006	5.244755542460055e+000
23	3	3.802154566368164e-006	3.431058800000000e-006	3.710957663681635e-007	1.081577985105250e+001
23	4	6.916454591562101e-004	6.264597200000001e-004	6.518573915621003e-005	1.040541587513560e+001
23	5	9.180497982975093e-004	1.066767700000000e-003	1.487179017024907e-004	1.394098281214277e+001
24	1	8.518970319394060e-004	9.135779100000000e-004	6.168087806059401e-005	6.751572841838306e+000
24	2	5.982474125959332e-005	6.061063000000000e-005	7.858887404066806e-007	1.296618663106918e+000
24	3	3.802154566368164e-006	3.431058800000000e-006	3.710957663681635e-007	1.081577985105250e+001
24	4	6.916454591562101e-004	6.264597200000001e-004	6.518573915621003e-005	1.040541587513560e+001
24	5	9.180497982975093e-004	1.066767700000000e-003	1.487179017024907e-004	1.394098281214277e+001
25	1	8.876642161643098e-004	9.679277400000000e-004	8.026352383569023e-005	8.292305356977394e+000
25	2	6.266556165811051e-005	6.860157700000000e-005	5.936015341889494e-006	8.652884673320985e+000
25	3	3.958163582530330e-006	7.169376200000000e-006	3.211212617469671e-006	4.479068370648022e+001
25	4	7.242606405011315e-004	7.369059600000000e-004	1.264531949886848e-005	1.716001794702337e+000
25	5	9.543239165670882e-004	1.304012100000000e-003	3.496881834329119e-004	2.681632965161228e+001
26	1	2.414836572774051e-004	2.238909200000000e-004	1.759273727740504e-005	7.857727002687308e+000
26	2	1.740861802923327e-005	1.767810000000000e-005	2.694819707667268e-007	1.524383111118993e+000
26	3	1.082470280955770e-006	8.577646900000000e-007	2.247055909557697e-007	2.619664735275705e+001
26	4	4.263648450678492e-004	3.074420400000000e-004	1.189228050678492e-004	3.868137391615318e+001
26	5	3.448427321770751e-004	3.374808900000000e-004	7.361842177075148e-006	2.181410087271948e+000
27	1	4.615296795074666e-004	4.476665900000000e-004	1.386308950746662e-005	3.096744277357536e+000
27	2	3.134372423502449e-005	2.638522300000000e-005	4.958501235024486e-006	1.879272058843121e+001
27	3	2.057617976501207e-006	3.584688100000000e-006	1.527070123498794e-006	4.259980452689297e+001
27	4	4.485753623388221e-004	4.299840900000000e-004	1.859127233882216e-005	4.323711684035138e+000
27	5	5.419009584303118e-004	4.867459100000000e-004	5.515504843031177e-005	1.133138405422077e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
28	1	9.091314277367681e-004	9.106011700000000e-004	1.469742263231926e-006	1.614035114002683e-001
28	2	5.596462568774088e-005	5.465510900000000e-005	1.309516687740882e-006	2.395963912066998e+000
28	3	4.046438852917353e-006	7.425425800000000e-006	3.378986947082647e-006	4.550563210910608e+001
28	4	4.810236951725898e-004	5.486132600000000e-004	6.758956482741027e-005	1.232007495178120e+001
28	5	7.950945973410394e-004	7.527699300000000e-004	4.232466734103936e-005	5.622523649561741e+000
29	1	1.778034946825509e-003	1.733973500000000e-003	4.406144682550951e-005	2.541068062776594e+000
29	2	9.502571540898245e-005	8.955898400000000e-005	5.466731408982457e-006	6.104056974320362e+000
29	3	8.004403124366482e-006	7.604659900000000e-006	3.997432243664822e-007	5.256556238188670e+000
29	4	5.273152427705167e-004	5.859876400000000e-004	5.867239722948331e-005	1.001256566255959e+001
29	5	1.047315463045259e-003	9.978497400000000e-004	4.946572304525914e-005	4.957231641435227e+000
30	1	1.778034946825509e-003	1.733973500000000e-003	4.406144682550951e-005	2.541068062776594e+000
30	2	9.502571540898245e-005	8.955898400000000e-005	5.466731408982457e-006	6.104056974320362e+000
30	3	8.004403124366482e-006	7.604659900000000e-006	3.997432243664822e-007	5.256556238188670e+000
30	4	5.273152427705167e-004	5.859876400000000e-004	5.867239722948331e-005	1.001256566255959e+001
30	5	1.047315463045259e-003	9.978497400000000e-004	4.946572304525914e-005	4.957231641435227e+000
31	1	2.494309312721878e-003	2.469598500000000e-003	2.471081272187791e-005	1.000600410223683e+000
31	2	1.222386668746275e-004	1.355258100000000e-004	1.328714312537249e-005	9.804142196510382e+000
31	3	1.143574828671557e-005	1.083088000000000e-005	6.046572304525914e-005	5.584664281347078e+000
31	4	5.603181716009669e-004	5.434581500000000e-004	1.686002160096694e-005	3.102358774262001e+000
31	5	1.165157927502472e-003	1.132748300000000e-003	3.240962750247225e-005	2.861149957362306e+000
32	1	3.264752556402789e-003	3.108891700000000e-003	1.558608564027884e-004	5.013389704208364e+000
32	2	1.482606730287879e-004	1.611383300000000e-004	1.287765697121211e-005	7.991678312175702e+000
32	3	1.527514135890476e-005	1.459480200000000e-005	6.803393589047641e-007	4.661518250845501e+000
32	4	5.890574327415152e-004	5.261917200000000e-004	6.286571274151517e-005	1.194730178223161e+001
32	5	1.235801180024422e-003	1.174761600000000e-003	6.103958002442187e-005	5.195912091816916e+000
33	1	3.264752556402789e-003	3.054157800000000e-003	2.105947564027886e-004	6.895346285080249e+000
33	2	1.482606730287879e-004	1.718808800000000e-004	2.362020697121211e-005	1.374219574115056e+001
33	3	1.527514135890476e-005	1.459480200000000e-005	6.803393589047641e-007	4.661518250845501e+000
33	4	5.890574327415152e-004	5.261917200000000e-004	6.286571274151517e-005	1.194730178223161e+001
33	5	1.235801180024422e-003	1.174761600000000e-003	6.103958002442187e-005	5.195912091816916e+000
34	1	4.770294990193314e-003	4.031073800000000e-003	7.392211901933142e-004	1.833807136434253e+001
34	2	1.929604493332290e-004	2.535808600000000e-004	6.062041066677099e-005	2.390575166705050e+001
34	3	2.323052511203423e-005	2.296761000000000e-005	2.629151120342305e-007	1.144721248898908e+000
34	4	6.348240056653949e-004	5.547155200000000e-004	8.010848566539490e-005	1.444136368591146e+001
34	5	1.286678927898443e-003	1.596370500000000e-003	3.096915721015566e-004	1.939973033212256e+001
35	1	5.427834171560760e-003	4.551334800000000e-003	8.764993715607598e-004	1.925807285284220e+001
35	2	2.110200265910009e-004	3.344892500000000e-004	1.234692234089992e-004	3.691276278953634e+001
35	3	2.695617347269613e-005	2.138522400000000e-004	1.868960665273039e-004	8.739495388372077e+001
35	4	6.550089802153470e-004	5.965035500000000e-004	5.850543021534700e-005	9.80806092236785e+000
35	5	1.298777877888177e-003	1.611549400000000e-003	3.127715221118233e-004	1.940812500763695e+001

```

Resp. Variancia debido a la regresión
=====
1          1.630771395031265e-007
2          1.012819952585428e-009
3          1.810114180025175e-009
4          1.876660192777162e-008
5          4.440979768451236e-008

```

Variancia total debido a la regresión = 4.581529464960422e-008

```

Resp. Índice de correlación
=====
1          9.999870212922029e-001
2          9.999544106744759e-001
3          9.986991914826182e-001
4          9.999862605158228e-001
5          9.999915318247686e-001

```

Índice general de correlación = 9.842897680094754e-001

#### Método de optimización: Buzzi Ferraris

Tipo de búsqueda: Minimización

Observación: Ninguna

Función Objetivo = 6.425828595848692e+000

Función Objetivo Inicial = 6.909534187039752e+001

Número máximo de iteraciones permitidas = 4000

Número de iteraciones realizadas = 13

Tiempo de búsqueda = 7 seg

Pendiente = 9.656735872146449e-001

Corte con el eje Y = 3.886404761729683e-005

	Parámetros iniciales	Parámetros optimizados	Estado	Variación absoluta	Variación porcentual(%)
	=====	=====	=====	=====	=====
1	4.285820000000000e-001	3.219414416180939e-001	Libre	1.066405583819062e-001	2.488218319525929e+001
2	4.235000000000000e-002	1.351750399201943e-002	Libre	2.883249600798057e-002	6.808145456429887e+001
3	4.439400000000000e-002	4.487872909791937e-002	Libre	-4.847290979193633e-004	1.091879753839175e+000
4	3.622700000000000e-001	3.646573733962795e-001	Libre	-2.387373396279535e-003	6.590038910976717e-001
5	2.600450000000000e+000	2.843959681262520e+000	Libre	-2.435096812625197e-001	9.364136255744956e+000
6	1.220000000000000e-003	1.182199108062414e-003	Libre	3.780089193758580e-005	3.098433765375885e+000
7	3.500000000000000e-002	2.275423954155503e-002	Libre	1.224576045844498e-002	3.498788702412850e+001
8	3.079900000000000e-002	3.004521465042234e-002	Libre	7.537853495776618e-004	2.447434493255177e+000
9	1.293740000000000e-001	1.069481974573464e-001	Libre	2.242580254265363e-002	1.733408763944350e+001
10	1.250000000000000e+002	1.127407225536403e+002	Libre	1.225927744635968e+001	9.807421957087740e+000
11	2.750000000000000e+001	2.536325505170797e+001	Libre	2.136744948292030e+000	7.769981630152836e+000
12	5.100000000000000e+001	5.175111914436707e+001	Libre	-7.511191443670668e-001	1.472782636013857e+000
13	5.500000000000000e+001	5.810332526691924e+001	Libre	-3.103325266919235e+000	5.642409576216791e+000
14	8.800000000000000e+001	9.131897575323225e+001	Libre	-3.318975753232252e+000	3.771563355945740e+000

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
1	1	9.120024704571382e-004	1.055214200000000e-003	1.432117295428617e-004	1.357181599175426e+001
1	2	5.008064641100665e-005	5.752921100000000e-005	7.448564588993349e-006	1.294744784348485e+001
1	3	3.740194531682448e-006	7.105364100000000e-006	3.365169568317552e-006	4.736097293476561e+001
1	4	3.275564969921752e-004	6.728360900000000e-004	3.452795930078247e-004	5.131704409729638e+001
1	5	5.062788968111744e-004	5.728699000000000e-004	6.659100318882568e-005	1.162410578541929e+001
2	1	8.593059033674955e-004	1.018225400000000e-003	1.589194966325044e-004	1.560749679123153e+001
2	2	4.066228810191399e-005	4.647568900000000e-005	5.813400898086009e-006	1.250847706224648e+001
2	3	3.789816889331822e-006	3.507873300000000e-006	2.819435893318216e-007	8.037450763453219e+000
2	4	3.048745821793058e-004	5.539080600000000e-004	2.490334778206942e-004	4.495935260820978e+001
2	5	5.509888919089006e-004	7.347005900000001e-004	1.837116980910995e-004	2.500497489611374e+001
3	1	1.868018430445909e-003	2.460149600000000e-003	5.921311695540909e-004	2.406890904333992e+001
3	2	8.596280204727316e-005	7.472671900000000e-005	1.123608304727316e-005	1.503623228429601e+001
3	3	8.237730922259368e-006	7.809498999999999e-006	4.282319222593682e-007	5.483474961189805e+000
3	4	6.124767149410218e-004	6.449878000000000e-004	3.251108505897824e-005	5.040573644800450e+000
3	5	1.124039466979288e-003	1.038409900000000e-003	8.562956697928822e-005	8.246220204496146e+000
4	1	8.097395261409779e-004	8.415594300000000e-004	3.181990385902212e-005	3.781064381754016e+000
4	2	3.165993926123739e-005	3.298153000000000e-005	1.321590738762611e-006	4.007063161601694e+000
4	3	3.982997290671814e-006	3.584688100000000e-006	3.983091906718138e-007	1.111140438332177e+001
4	4	2.764307122850768e-004	3.701415800000000e-004	9.371086771492324e-005	2.531757380916871e+001
4	5	5.694842189892799e-004	6.293081100000000e-004	5.982389101072004e-005	9.506295892280816e+000
5	1	1.660376547580022e-003	1.963510600000000e-003	3.031340524199786e-004	1.543837106965343e+001
5	2	6.427719934737844e-005	5.427817800000000e-005	9.999021347378445e-006	1.842180728206913e+001
5	3	8.167639524722419e-006	7.374215800000000e-006	7.934237247224191e-007	1.075943186694400e+001
5	4	5.529517140614868e-004	4.958356700000000e-004	5.711604406148684e-005	1.151914787846684e+001
5	5	1.143067093292727e-003	1.247312200000000e-003	1.042451067072734e-004	8.357579337977567e+000
6	1	1.590623248570506e-003	1.887459200000000e-003	2.968359514294941e-004	1.572674797047237e+001
6	2	6.263764854591179e-005	5.145118800000000e-005	1.118646054591179e-005	2.174188970313336e+001
6	3	7.824003593116585e-006	6.990142100000000e-006	8.338614931165845e-007	1.192910646432473e+001
6	4	5.527879446969173e-004	4.959210600000000e-004	5.686688469691732e-005	1.146692271889347e+001
6	5	1.135876485684513e-003	1.247527100000000e-003	1.116506143154872e-004	8.949754623806342e+000
7	1	7.358955800846359e-004	7.976761600000000e-004	6.178057991536410e-005	7.745070369830796e+000
7	2	2.369615823189974e-005	2.810026100000000e-005	4.404102768100264e-006	1.567281801439590e+001
7	3	4.256319330422856e-006	5.453846800000000e-006	1.197527469577144e-006	2.195748273635307e+001
7	4	2.422898152865125e-004	2.732818200000000e-004	3.099200471348750e-005	1.134067561226265e+001
7	5	5.439434437708459e-004	7.124596700000000e-004	1.685162262291541e-004	2.365273900053235e+001
8	1	1.444152398826270e-003	1.640099800000000e-003	1.959474011737296e-004	1.194728523067496e+001
8	2	4.686780332770871e-005	4.485487800000000e-005	2.012925327708710e-006	4.487639733874005e+000
8	3	8.349843451224238e-006	8.961720600000000e-006	6.118771487757625e-007	6.827674908496505e+000
8	4	4.849386612205888e-004	4.400458400000000e-004	4.489282122058875e-005	1.020185106637726e+001
8	5	1.086963382304145e-003	1.273013900000000e-003	1.860505176958550e-004	1.461496356762916e+001
9	1	1.251820297495379e-003	1.310735600000000e-003	5.891530250462128e-005	4.494827370571248e+000
9	2	3.120363017223887e-005	3.745759400000000e-005	6.253963827761129e-006	1.669611728868952e+001
9	3	9.087226341695076e-006	1.152221200000000e-005	2.434985658304925e-006	2.113297046005511e+001
9	4	3.934432489169135e-004	3.915693700000000e-004	1.873878916913479e-006	4.785560517446703e-001
9	5	9.636043122793641e-004	9.904946200000001e-004	2.689030772063598e-005	2.714836322951050e+000



Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
10	1	4.722964103010917e-003	5.745342900000000e-003	1.022378796989083e-003	1.779491345919637e+001
10	2	1.210152334917524e-004	9.918959400000000e-005	2.182563949175239e-005	2.200396091121452e+001
10	3	3.421114102679567e-005	3.191653000000000e-005	2.294611026795671e-006	7.189412592144794e+000
10	4	1.582306974939902e-003	1.422513400000000e-003	1.597935749399022e-004	1.123318591866356e+001
10	5	3.864285989742004e-003	3.415213000000000e-003	4.490729897420036e-004	1.314919420083033e+001
11	1	2.824033291451332e-003	2.923948700000000e-003	9.991540854866745e-005	3.417139587594935e+000
11	2	6.802351262684842e-005	6.831888500000001e-005	2.953723731515835e-007	4.323436677158644e-001
11	3	2.237397235207247e-005	5.569069600000000e-005	3.331672364792754e-005	5.982457760615441e+001
11	4	9.235827599042687e-004	1.072957200000000e-003	1.493744400957314e-004	1.392175196696862e+001
11	5	2.272866316224904e-003	1.970974500000000e-003	3.018918162249035e-004	1.531688087415152e+001
12	1	3.664671314400382e-003	3.749759900000000e-003	8.508858559961793e-005	2.269174236985625e+000
12	2	7.573857360751381e-005	6.824349099999999e-005	7.495082607513815e-006	1.098285345266674e+001
12	3	3.530078631069346e-005	2.908718300000000e-005	6.213603310693463e-006	2.136199751860970e+001
12	4	1.237355061178396e-003	1.142814900000000e-003	9.454016117839588e-005	8.272569877973755e+000
12	5	3.134837138355409e-003	2.999830300000000e-003	1.350068383554094e-004	4.500482522475002e+000
13	1	2.163568153887847e-003	2.160169000000000e-003	3.399153887846760e-006	1.573559239044149e-001
13	2	4.174615336623774e-005	5.013192300000000e-005	8.385769633762268e-006	1.672740467937419e+001
13	3	2.32747571800591e-005	4.864934100000000e-005	2.532458528199409e-005	5.205535113413785e+001
13	4	7.063697066692626e-004	7.262153700000000e-004	1.984566333073745e-005	2.732751763535031e+000
13	5	1.782648964360632e-003	1.796402300000000e-003	1.375333563936811e-005	7.656044327803470e-001
14	1	2.196222446229667e-003	2.189360600000000e-003	6.861846229667002e-006	3.134178184108639e-001
14	2	4.204591564167063e-005	5.013192300000000e-005	8.086007358329376e-006	1.612945778746484e+001
14	3	2.369806682574243e-005	5.837921000000000e-005	3.468114317425757e-005	5.940666750073797e+001
14	4	7.048314919959564e-004	7.229546300000000e-004	1.812313800404362e-005	2.506815400579649e+000
14	5	1.778765009943769e-003	1.788336300000000e-003	9.571290056231306e-006	5.352063846286241e-001
15	1	2.579442354603283e-003	2.468023900000000e-003	1.114184546032828e-004	4.514480374492436e+000
15	2	4.457555121278220e-005	4.415755800000000e-005	4.179932127822006e-007	9.465949470806349e-001
15	3	3.544712239665175e-005	2.817820900000000e-005	7.268913396651749e-006	2.579622216817169e+001
15	4	9.200853592475125e-004	9.770368900000001e-004	5.695153075248761e-005	5.829005161973731e+000
15	5	2.299178205765071e-003	2.302252500000000e-003	3.074294234929002e-006	1.335341903170483e-001
16	1	8.700015181175957e-004	6.875263600000000e-004	1.824751581175957e-004	2.654082355730996e+001
16	2	3.145579156393720e-005	3.200150600000000e-005	5.457144360628024e-007	1.705277358080593e+000
16	3	3.827000911240753e-006	3.623095400000000e-006	2.039055112407527e-007	5.627936577125533e+000
16	4	2.217166591705015e-004	3.215564100000000e-004	9.983975082949849e-005	3.104890704231288e+001
16	5	4.031539788247418e-004	3.484490200000000e-004	5.470495882474181e-005	1.569955881200120e+001
17	1	8.700015181175957e-004	6.875263600000000e-004	1.824751581175957e-004	2.654082355730996e+001
17	2	3.145579156393720e-005	3.200150600000000e-005	5.457144360628024e-007	1.705277358080593e+000
17	3	3.827000911240753e-006	3.623095400000000e-006	2.039055112407527e-007	5.627936577125533e+000
17	4	2.217166591705015e-004	3.215564100000000e-004	9.983975082949849e-005	3.104890704231288e+001
17	5	4.031539788247418e-004	3.484490200000000e-004	5.470495882474181e-005	1.569955881200120e+001
18	1	9.739670385110451e-004	8.131362300000000e-004	1.608308085110452e-004	1.977907299875756e+001
18	2	4.418445671168064e-005	4.372408500000000e-005	4.603717116806336e-007	1.052901877033295e+000
18	3	4.295371061559492e-006	3.712712900000000e-006	5.826581615594921e-007	1.569359595673267e+001
18	4	3.069096294295686e-004	4.963713600000000e-004	1.894617305704314e-004	3.816935178742613e+001
18	5	5.671455828597184e-004	5.520390700000000e-004	1.510651285971843e-005	2.736493426039289e+000

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
19	1	8.677141886011994e-004	8.493566400000001e-004	1.835754860119940e-005	2.161347511358644e+000
19	2	5.011738530264719e-005	5.402374500000000e-005	3.906359697352808e-006	7.230819887352882e+000
19	3	3.855081311913478e-006	6.990142100000000e-006	3.135060788086522e-006	4.484974329901709e+001
19	4	4.092699670164476e-004	4.740973500000000e-004	6.482738298355242e-005	1.367385474387326e+001
19	5	7.047929490803876e-004	7.030227000000000e-004	1.770249080387614e-006	2.518053941057115e-001
20	1	8.792655168002818e-004	9.396389400000000e-004	6.037342319971818e-005	6.425172545501166e+000
20	2	5.526904119943560e-005	4.783264000000000e-005	7.436401199435600e-006	1.554670868978923e+001
20	3	3.920885992406099e-006	7.220585800000000e-006	3.299699807593901e-006	4.569850561977813e+001
20	4	4.813400910157952e-004	5.689075300000000e-004	8.756743898420477e-005	1.539220951851433e+001
20	5	7.908959013262537e-004	7.964549000000000e-004	5.558998673746364e-006	6.979677912391981e-001
21	1	8.790968976361777e-004	9.342231800000000e-004	5.512628236382228e-005	5.900761567896686e+000
21	2	5.805043308381904e-005	5.846211600000000e-005	4.116829161809619e-007	7.041875052571855e-001
21	3	3.928527913022086e-006	3.610292900000000e-006	3.182350130220860e-007	8.814659138101675e+000
21	4	5.375093690226614e-004	4.577974900000000e-004	7.971187902266141e-005	1.741203933264497e+001
21	5	8.437122380223050e-004	6.788522000000000e-004	1.648600380223050e-004	2.428511508430038e+001
22	1	8.316228762904432e-004	9.262530900000000e-004	9.463021370955684e-005	1.021645322765475e+001
22	2	5.830896169343408e-005	5.390124000000000e-005	4.407721693434079e-006	8.177403142180179e+000
22	3	3.727950559415215e-006	3.328639000000000e-006	3.993115594152154e-007	1.199624108878179e+001
22	4	6.223051056121239e-004	5.984871500000000e-004	2.381795561212392e-005	3.979693734798469e+000
22	5	8.819595874236834e-004	9.786008200000000e-004	9.664123257631667e-005	9.875449785165383e+000
23	1	8.432881510841354e-004	9.933550600000000e-004	1.500669089158646e-004	1.510707650856126e+001
23	2	6.066065296917588e-005	6.313607400000000e-005	2.475421030824123e-006	3.920771238997411e+000
23	3	3.781257116641238e-006	3.431058800000000e-006	3.501983166412381e-007	1.020671276870097e+001
23	4	6.919167271835326e-004	6.264597200000001e-004	6.545700718353252e-005	1.044871762601632e+001
23	5	9.259426377397304e-004	1.066767700000000e-003	1.408250622602696e-004	1.320109919528587e+001
24	1	8.432881510841354e-004	9.135779100000000e-004	7.028975891586458e-005	7.693898697251182e+000
24	2	6.066065296917588e-005	6.061063000000000e-005	5.002296917587892e-008	8.253167666443810e-002
24	3	3.781257116641238e-006	3.431058800000000e-006	3.501983166412381e-007	1.020671276870097e+001
24	4	6.919167271835326e-004	6.264597200000001e-004	6.545700718353252e-005	1.044871762601632e+001
24	5	9.259426377397304e-004	1.066767700000000e-003	1.408250622602696e-004	1.320109919528587e+001
25	1	8.786471846124191e-004	9.679277400000000e-004	8.928055538758094e-005	9.223886422304719e+000
25	2	6.355792633438413e-005	6.860157700000000e-005	5.043650665615868e-006	7.352091433139894e+000
25	3	3.936468239567017e-006	7.169376200000000e-006	3.232907960432984e-006	4.509329501265373e+001
25	4	7.243446200415879e-004	7.369059600000000e-004	1.256133995841213e-005	1.704605558952479e+000
25	5	9.625411806632213e-004	1.304012100000000e-003	3.414709193367788e-004	2.618617720930494e+001
26	1	2.383993086990784e-004	2.238909200000000e-004	1.450838869907837e-005	6.480114825147160e+000
26	2	1.766860132226823e-005	1.767810000000000e-005	9.498677731767689e-009	5.373132707569077e-002
26	3	1.076603163221330e-006	8.577646900000000e-007	2.188384732213299e-007	2.551264650697266e+001
26	4	4.263809358118422e-004	3.074420400000000e-004	1.189388958118422e-004	3.868660766492512e+001
26	5	3.479875173107617e-004	3.374808900000000e-004	1.050662731076168e-005	3.113251037936306e+000
27	1	4.566387085885911e-004	4.476665900000000e-004	8.972118588591036e-006	2.004196602786694e+000
27	2	3.173617444138863e-005	2.638522300000000e-005	5.350951441388631e-006	2.028010694239208e+001
27	3	2.046095731818760e-006	3.584688100000000e-006	1.538592368181240e-006	4.292123401701923e+001
27	4	4.494680156165938e-004	4.299840900000000e-004	1.948392561659383e-005	4.531313150817704e+000
27	5	5.461384962672792e-004	4.867459100000000e-004	5.939258626727915e-005	1.220196925070806e+001

Pto. Exp.	Resp.	Respuestas teóricas	Resp. experimentales	Diferencia absoluta	Diferencia porcentual(%)
28	1	9.025471813050958e-004	9.106011700000000e-004	8.053988694904212e-006	8.844693989251312e-001
28	2	5.644410293639153e-005	5.465510900000000e-005	1.788993936391529e-006	3.273241914843731e+000
28	3	4.022644163133983e-006	7.425425800000000e-006	3.402781636866016e-006	4.582608093486055e+001
28	4	4.823906939548393e-004	5.486132600000000e-004	6.622256604516078e-005	1.207090146620969e+001
28	5	7.998778132988932e-004	7.527699300000000e-004	4.710788329889324e-005	6.257939035754688e+000
29	1	1.773585189222569e-003	1.733973500000000e-003	3.961168922256872e-005	2.284446055407924e+000
29	2	9.532686625127907e-005	8.955898400000000e-005	5.767882251279073e-006	6.440316754016630e+000
29	3	7.954451563770751e-006	7.604659900000000e-006	3.497916637707512e-007	4.599701608887878e+000
29	4	5.282709411969060e-004	5.859876400000000e-004	5.771669880309403e-005	9.849473753933451e+000
29	5	1.050787893867358e-003	9.978497400000000e-004	5.293815386735786e-005	5.305222995534164e+000
30	1	1.773585189222569e-003	1.733973500000000e-003	3.961168922256872e-005	2.284446055407924e+000
30	2	9.532686625127907e-005	8.955898400000000e-005	5.767882251279073e-006	6.440316754016630e+000
30	3	7.954451563770751e-006	7.604659900000000e-006	3.497916637707512e-007	4.599701608887878e+000
30	4	5.282709411969060e-004	5.859876400000000e-004	5.771669880309403e-005	9.849473753933451e+000
30	5	1.050787893867358e-003	9.978497400000000e-004	5.293815386735786e-005	5.305222995534164e+000
31	1	2.495820045763953e-003	2.469598500000000e-003	2.622154576395301e-005	1.061773635024196e+000
31	2	1.222413554885533e-004	1.355258100000000e-004	1.328445451144667e-005	9.802158357472036e+000
31	3	1.136216653037478e-005	1.083088000000000e-005	5.312865303747837e-007	4.905294217780861e+000
31	4	5.605277868681814e-004	5.434581500000000e-004	1.706963686818144e-005	3.140929410697298e+000
31	5	1.166937398061311e-003	1.132748300000000e-003	3.418909806131125e-005	3.018243157929370e+000
32	1	3.275840097115578e-003	3.108891700000000e-003	1.669483971155775e-004	5.370029361768295e+000
32	2	1.478812251731594e-004	1.611383300000000e-004	1.325710482684059e-005	8.227157887785355e+000
32	3	1.517454689579396e-005	1.459480200000000e-005	5.797448957939617e-007	3.972269687481624e+000
32	4	5.883889700261662e-004	5.261917200000000e-004	6.219725002616617e-005	1.182026391942583e+001
32	5	1.235469180177020e-003	1.174761600000000e-003	6.070758017702005e-005	5.167651051670402e+000
33	1	3.275840097115578e-003	3.054157800000000e-003	2.216822971155778e-004	7.258377321419927e+000
33	2	1.478812251731594e-004	1.718808800000000e-004	2.399965482684059e-005	1.396295785013469e+001
33	3	1.517454689579396e-005	1.459480200000000e-005	5.797448957939617e-007	3.972269687481624e+000
33	4	5.883889700261662e-004	5.261917200000000e-004	6.219725002616617e-005	1.182026391942583e+001
33	5	1.235469180177020e-003	1.174761600000000e-003	6.070758017702005e-005	5.167651051670402e+000
34	1	4.807104428799523e-003	4.031073800000000e-003	7.760306287995233e-004	1.925121362946824e+001
34	2	1.917833006331640e-004	2.535808600000000e-004	6.179755936683596e-005	2.436996205740290e+001
34	3	2.307327705299182e-005	2.296761000000000e-005	1.056670529918189e-007	4.600698679219076e-001
34	4	6.324834799457926e-004	5.547155200000000e-004	7.776795994579263e-005	1.401943106725996e+001
34	5	1.282351535878027e-003	1.596370500000000e-003	3.140189641219729e-004	1.967080725445458e+001
35	1	5.478583925373187e-003	4.551334800000000e-003	9.272491253731864e-004	2.037312494288899e+001
35	2	2.094901713660963e-004	3.344892500000000e-004	1.249990786339037e-004	3.737013331038402e+001
35	3	2.677218957527269e-005	2.138522400000000e-004	1.870800504247273e-004	8.748098707066492e+001
35	4	6.519509961486639e-004	5.965035500000000e-004	5.544744614866383e-005	9.295409247549964e+000
35	5	1.292902515141385e-003	1.611549400000000e-003	3.186468848586147e-004	1.977270351492884e+001

```

Resp.  Variancia debido a la regresión
=====
1          1.611959742572325e-007
2          1.036489251233249e-009
3          1.815137457699729e-009
4          1.844644772857028e-008
5          4.126968988406177e-008

Variancia total debido a la regresión =   4.475274771575949e-008

Resp.  Índice de correlación
=====
1          9.999871710081638e-001
2          9.999533452407518e-001
3          9.986955792299945e-001
4          9.999864949100554e-001
5          9.999921305910120e-001

Índice general de correlación =   9.846569584481199e-001

```

## APÉNDICE B. PROTOTIPOS DE LAS RUTINAS DE OPTIMIZACIÓN

### PROTOTIPO DEL MÉTODO DE BÚSQUEDA DIRECTA IMPLEMENTADO POR HOOKE Y JEEVES

```
////////////////////////////////////
// Prototipo del método de optimización de búsqueda directa
DllExport void BusqDir(
    REAL *vrPar,                // Vector de parámetros a ajustar
    REAL *mrResTeo,             // Matriz de respuestas teóricas
    REAL *mrtRes,               // Matriz de respuestas experimentales
    REAL *mrVarInd,             // Matriz de variables independientes
    REAL &rFunObj,              // Función objetivo
    int iNumPar,                // Número de parámetros
    int iNumRes,                // Número de respuestas
    int iNumPtsExp,             // Número de puntos experimentales
    int iNumVarInd,             // Número de variables independientes
    int &iIter,                  // Número de iteraciones
    int iNumMaxIter,            // Número máximo de iteraciones permitidas
    void (*fModelo) (REAL *, REAL *, REAL *, int &), // Modelo matemático
    REAL (*fFunObj) (REAL *, REAL *, int *, int, int, int, int &), // Función objetivo
    int &iMensaje,              // Mensaje de observación o de error
    REAL *vrPasoBusq = NULL,    // Vector paso de búsqueda
    REAL *vrTol = NULL,         // Vector de tolerancias
    int *miNumDup = NULL,       // Matriz de número de duplicados por experiencia
    REAL *vrParLimInf = NULL,    // Vector de límites inferiores de los parámetros
    REAL *vrParLimSup = NULL,    // Vector de límites superiores de los parámetros
    bool bMin = true,           // Tipo de búsqueda (mínimo (true) o máximo (false))
    bool bSalPro = true,        // Tipo de salida (propio del método (true) o no
                                // (false))
    bool bFunObj = false,       // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                // función objetivo actual sea menor a
                                // rTol1)
    bool bVarFunObj = false,    // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                // variación de la función objetivo actual y la
                                // anterior sea menor a rTol2)
    bool bPaso = false,         // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando el
                                // vector paso de búsqueda sea menor a el vector
                                // vrTolS)
    REAL rTol1 = 0.001,         // Tolerancia 1 (para bFunObj)
    REAL rTol2 = 0.001,         // Tolerancia 2 (para bVarFunObj)
    REAL *vrTolS = NULL,        // Vector de tolerancias (para bPaso)
    int *viParFijo = NULL,      // Vector que indica si los parámetros se encontrarán
                                // libres o fijos (0 = libre, 1 = fijo)
    REAL rH = 1,                // Velocidad del paso de búsqueda
    bool bHVar = false,         // Regulador del paso de búsqueda (true = variable,
                                // false = constante)
    bool bResultInt = false     // Indica si serán almacenados los resultados
                                // intermedios
);
```

## PROTOTIPO DEL MÉTODO DE SIMPLEX FLEXIBLE

```

/////////////////////////////////////////////////////////////////
// Prototipo del método de optimización de simplex flexible
DllExport void SimplexF(
    REAL *vrPar,                // Vector de parámetros a ajustar
    REAL *mrResTeo,             // Matriz de respuestas teóricas
    REAL *mrtRes,               // Matriz de respuestas experimentales
    REAL *mrVarInd,             // Matriz de variables independientes
    REAL &rFunObj,               // Función objetivo
    int iNumPar,                // Número de parámetros
    int iNumRes,                // Número de respuestas
    int iNumPtsExp,             // Número de puntos experimentales
    int iNumVarInd,             // Número de variables independientes
    int &iIter,                  // Número de iteraciones
    int iNumMaxIter,            // Número máximo de iteraciones permitidas
    void (*fModelo) (REAL *, REAL *, REAL *, int &), // Modelo matemático
    REAL (*fFunObj) (REAL *, REAL *, int *, int, int, int, int &), // Función objetivo
    int &iMensaje,              // Mensaje de observación o de error
    REAL rCProy = 1,            // Coeficiente de proyección
    REAL rCExp = 2,              // Coeficiente de expansión
    REAL rCRed = 0.5,            // Coeficiente de reducción
    REAL *vrDist = NULL,        // Vector de distancias entre los vértices del simplex
    int *miNumDup = NULL,        // Matriz de número de duplicados por experiencia
    REAL *vrParLimInf = NULL,    // Vector de límites inferiores de los parámetros
    REAL *vrParLimSup = NULL,    // Vector de límites superiores de los parámetros
    bool bMin = true,            // Tipo de búsqueda (mínimo (true) o máximo (false))
    bool bSalPro = true,         // Tipo de salida (propio del método (true) o no
                                // (false))
    bool bFunObj = false,        // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                // función objetivo actual sea menor a rTol1)
    bool bVarFunObj = false,     // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                // variación de la función objetivo actual y la
                                // anterior sea menor a rTol2)
    bool bPaso = false,          // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando el
                                // vector paso de búsqueda sea menor a el
                                // vector vrTols)
    REAL rTol1 = 0.001,          // Tolerancia 1 (para bFunObj)
    REAL rTol2 = 0.001,          // Tolerancia 2 (para bVarFunObj)
    REAL *vrTols = NULL,         // Vector de tolerancias (para bPaso)
    int *viParFijo = NULL,       // Vector que indica si los parámetros se encontrarán
                                // libres o fijos (0 = libre, 1 = fijo)
    bool bResultInt = false      // Indica si serán almacenados los resultados
                                // intermedios
);

```

## PROTOTIPO DEL MÉTODO DE GAUSS NEWTON

```

////////////////////////////////////
// Prototipo del método de optimización de Gauss Newton
DllExport void GaussN(
    REAL *vrPar,           // Vector de parámetros a ajustar
    REAL *mrResTeo,        // Matriz de respuestas teóricas
    REAL *mrtRes,          // Matriz de respuestas experimentales
    REAL *mrVarInd,        // Matriz de variables independientes
    REAL &rFunObj,          // Función objetivo
    int iNumPar,           // Número de parámetros
    int iNumRes,           // Número de respuestas
    int iNumPtsExp,        // Número de puntos experimentales
    int iNumVarInd,        // Número de variables independientes
    int &iIter,            // Número de iteraciones
    int iNumMaxIter,       // Número máximo de iteraciones permitidas
    void (*fModelo) (REAL *, REAL *, REAL *, int &), // Modelo matemático
    void (*fDerivadas) (REAL *, REAL *, REAL *, int *, int &), // Derivadas del modelo matemático en función de los
                                                                // parámetros
    REAL (*fFunObj) (REAL *, REAL *, int *, int, int, int, int &), // Función objetivo
    int &iMensaje,         // Mensaje de observación o de error
    bool bDervN            = true, // Indica si se utilizará derivadas numéricas o
                                                                // analíticas (true = numéricas, false =
                                                                // analíticas)
    int *miNumDup          = NULL, // Matriz de número de duplicados por experiencia
    REAL *vrParLimInf      = NULL, // Vector de límites inferiores de los parámetros
    REAL *vrParLimSup      = NULL, // Vector de límites superiores de los parámetros
    bool bMin              = true, // Tipo de búsqueda (mínimo (true) o máximo (false))
    bool bSalPro           = true, // Tipo de salida (propio del método (true) o no
                                                                // (false))
    bool bFunObj           = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                                                // función objetivo actual sea menor a rTol1)
    bool bVarFunObj        = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                                                // variación de la función objetivo actual y la
                                                                // anterior sea menor a rTol2)
    bool bPaso             = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando el
                                                                // vector paso de búsqueda sea menor a el
                                                                // vector vrTolS)
    REAL rTol1             = 0.001, // Tolerancia 1 (para bFunObj)
    REAL rTol2             = 0.001, // Tolerancia 2 (para bVarFunObj)
    REAL *vrTolS           = NULL, // Vector de tolerancias (para bPaso)
    int *viParFijo         = NULL, // Vector que indica si los parámetros se encontrarán
                                                                // libres o fijos (0 = libre, 1 = fijo)
    REAL rH                = 1,     // Velocidad del paso de búsqueda
    bool bHVar             = false, // Regulador del paso de búsqueda (true = variable,
                                                                // false = constante)
    bool bResultInt        = false  // Indica si serán almacenados los resultados
                                                                // intermedios
);

```

## PROTOTIPO DEL MÉTODO DE MÁXIMA PENDIENTE

```

/////////////////////////////////////////////////////////////////
// Prototipo del método de optimización de máxima pendiente
DllExport void MaxPend(
    REAL *vrPar,                // Vector de parámetros a ajustar
    REAL *mrResTeo,             // Matriz de respuestas teóricas
    REAL *mrtRes,               // Matriz de respuestas experimentales
    REAL *mrVarInd,             // Matriz de variables independientes
    REAL &rFunObj,               // Función objetivo
    int iNumPar,                // Número de parámetros
    int iNumRes,                // Número de respuestas
    int iNumPtsExp,             // Número de puntos experimentales
    int iNumVarInd,             // Número de variables independientes
    int &iIter,                  // Número de iteraciones
    int iNumMaxIter,            // Número máximo de iteraciones permitidas
    void (*fModelo) (REAL *, REAL *, REAL *, int &), // Modelo matemático
    void (*fDerivadas) (REAL *, REAL *, REAL *, int *, int &), // Derivadas del modelo matemático en función de los
                                                                // parámetros
    REAL (*fFunObj) (REAL *, REAL *, int *, int, int, int, int &), // Función objetivo
    int &iMensaje,              // Mensaje de observación o de error
    bool bDervN = true,         // Indica si se utilizará derivadas numéricas o
                                                                // analíticas (true = numéricas, false =
                                                                // analíticas)
    int *miNumDup = NULL,       // Matriz de número de duplicados por experiencia
    REAL *vrParLimInf = NULL,   // Vector de límites inferiores de los parámetros
    REAL *vrParLimSup = NULL,   // Vector de límites superiores de los parámetros
    bool bMin = true,           // Tipo de búsqueda (mínimo (true) o máximo (false))
    bool bSalPro = true,        // Tipo de salida (propio del método (true) o no
                                                                // (false))
    bool bFunObj = false,       // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                                                // función objetivo actual sea menor a rTol1)
    bool bVarFunObj = false,    // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                                                // variación de la función objetivo actual y la
                                                                // anterior sea menor a rTol2)
    bool bPaso = false,         // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando el
                                                                // vector paso de búsqueda sea menor a el
                                                                // vector vrTolS)
    REAL rTol1 = 0.001,         // Tolerancia 1 (para bFunObj)
    REAL rTol2 = 0.001,         // Tolerancia 2 (para bVarFunObj)
    REAL *vrTolS = NULL,       // Vector de tolerancias (para bPaso)
    int *viParFijo = NULL,     // Vector que indica si los parámetros se encuentran
                                                                // libres o fijos (0 = libre, 1 = fijo)
    REAL rH = 1,                // Velocidad del paso de búsqueda
    bool bHVar = false,         // Regulador del paso de búsqueda (true = variable,
                                                                // false = constante)
    bool bResultInt = false     // Indica si serán almacenados los resultados
                                                                // intermedios
);

```



## PROTOTIPO DEL MÉTODO DE LEVENBERG MARQUARDT

```

/////////////////////////////////////////////////////////////////
// Prototipo del método de optimización de Marquardt
DllExport void Marq(
    REAL *vrPar,           // Vector de parámetros a ajustar
    REAL *mrResTeo,        // Matriz de respuestas teóricas
    REAL *mrtRes,          // Matriz de respuestas experimentales
    REAL *mrVarInd,        // Matriz de variables independientes
    REAL &rFunObj,          // Función objetivo
    int iNumPar,           // Número de parámetros
    int iNumRes,           // Número de respuestas
    int iNumPtsExp,        // Número de puntos experimentales
    int iNumVarInd,        // Número de variables independientes
    int &iIter,            // Número de iteraciones
    int iNumMaxIter,       // Número máximo de iteraciones permitidas
    void (*fModelo) (REAL *, REAL *, REAL *, int &), // Modelo matemático
    void (*fDerivadas) (REAL *, REAL *, REAL *, int *, int &), // Derivadas del modelo matemático en función de los
                                                                // parámetros
    REAL (*fFunObj) (REAL *, REAL *, int *, int, int, int, int &), // Función objetivo
    int &iMensaje,         // Mensaje de observación o de error
    bool bDervN            = true, // Indica si se utilizará derivadas numéricas o
                                                                // analíticas (true = numéricas, false =
                                                                // analíticas)
    REAL rLambda           = 1,    // Factor Lambda
    REAL rMLamb            = 10,   // Factor que modifica a la Lambda
    int *miNumDup          = NULL, // Matriz de número de duplicados por experiencia
    REAL *vrParLimInf      = NULL, // Vector de límites inferiores de los parámetros
    REAL *vrParLimSup      = NULL, // Vector de límites superiores de los parámetros
    bool bMin              = true, // Tipo de búsqueda (mínimo (true) o máximo (false))
    bool bSalPro           = true, // Tipo de salida (propio del método (true) o no
                                                                // (false))
    bool bFunObj           = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                                                // función objetivo actual sea menor a rTol1)
    bool bVarFunObj        = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                                                                // variación de la función objetivo actual y la
                                                                // anterior sea menor a rTol2)
    bool bPaso             = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando el
                                                                // vector paso de búsqueda sea menor a el vector
                                                                // vrTolS)
    REAL rTol1             = 0.001, // Tolerancia 1 (para bFunObj)
    REAL rTol2             = 0.001, // Tolerancia 2 (para bVarFunObj)
    REAL *vrTolS           = NULL, // Vector de tolerancias (para bPaso)
    int *viParFijo         = NULL, // Vector que indica si los parámetros se encontrarán
                                                                // libres o fijos (0 = libre, 1 = fijo)
    REAL rH                = 1,    // Velocidad del paso de búsqueda
    bool bHVar             = false, // Regulador del paso de búsqueda (true = variable,
                                                                // false = constante)
    bool bResultInt        = false // Indica si serán almacenados los resultados
                                                                // intermedios
);

```

## PROTOTIPO DEL MÉTODO DE BUZZI FERRARIS

```

/////////////////////////////////////////////////////////////////
// Prototipo del método de optimización de Buzzi Ferraris (programa optnov)
DllExport void BuzziF(
    REAL *vrPar,           // Vector de parámetros a ajustar
    REAL *mrResTeo,        // Matriz de respuestas teóricas
    REAL *mrRes,           // Matriz de respuestas experimentales
    REAL *mrVarInd,        // Matriz de variables independientes
    REAL &rFunObj,          // Función objetivo
    int iNumPar,           // Número de parámetros
    int iNumRes,           // Número de respuestas
    int iNumPtsExp,        // Número de puntos experimentales
    int iNumVarInd,        // Número de variables independientes
    int &iIter,            // Número de iteraciones
    int iNumMaxIter,       // Número máximo de iteraciones permitidas
    void (*fModelo) (REAL *, REAL *, REAL *, int &), // Modelo matemático
    REAL (*fFunObj) (REAL *, REAL *, int *, int, int, int, int &), // Función objetivo
    int &iMensaje,         // Mensaje de observación o de error
    int *miNumDup = NULL,  // Matriz de número de duplicados por experiencia
    REAL *vrParLimInf = NULL, // Vector de límites inferiores de los parámetros
    REAL *vrParLimSup = NULL, // Vector de límites superiores de los parámetros
    bool bMin = true,      // Tipo de búsqueda (mínimo (true) o máximo (false))
    bool bSalPro = true,   // Tipo de salida (propio del método (true) o no
                          // (false))
    bool bFunObj = false,  // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                          // función objetivo actual sea menor a rTol1)
    bool bVarFunObj = false, // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando la
                          // variación de la función objetivo actual y la
                          // anterior sea menor a rTol2)
    bool bPaso = false,    // Tipo de salida (Si es true se saldrá cuando el
                          // vector paso de búsqueda sea menor a el
                          // vector vrTolS)
    REAL rTol1 = 0.001,    // Tolerancia 1 (para bFunObj)
    REAL rTol2 = 0.001,    // Tolerancia 2 (para bVarFunObj)
    REAL *vrTolS = NULL,   // Vector de tolerancias (para bPaso)
    int *viParFijo = NULL, // Vector que indica si los parámetros se encontrarán
                          // libres o fijos (0 = libre, 1 = fijo)
    bool bResultInt = false, // Indica si serán almacenados los resultados
                          // intermedios
    int iPrecision = 90000 // Indica la precisión con que trabajará el método
);

```