Ciencia y Filosofía ISSN: 2594-2204

ARTÍCULO CIENTÍFICO

Ajuste lineal por mínimos cuadrados de funciones exponenciales en datos

experimentales

Linealización de ecuaciones exponenciales

Linear least squares fit of exponential functions in experimental data

Linearization of exponential equations

Jose Manuel Torres Valencia jmanueltova8@hotmail.com

FES Cuautitlán UNAM

DOI: https://doi.org/10.38128/cienciayfilosofa.v6i6.38

Resumen.

Se contribuye a dar claridad a operaciones matemáticas en donde existen datos

experimentales aleatorios que presentan un comportamiento exponencial, donde la

principal prioridad es linealizarlos para diagnosticar un comportamiento predictivo en

proyectos ajustados a recursos limitados.

Palabras claves: proceso, análisis cuantitativo, paradigma, comportamiento exponencial,

mínimos cuadrados.

Abstract.

It contributes to clarify mathematical operations where there are random experimental

data that present an exponential behavior, where the main priority is to linearize them to

diagnose predictive behavior in projects adjusted to limited resources.

Keywords: process, quantitative analysis, paradigm, exponential behavior, least squares.

Enviado: 19.09:2021

Aprobado: 05.11:2021

Publicado: 21.12:2021

Introducción.

Resulta cuestionable el fomento de vocaciones científicas si no se retoma la parte de las discusiones en torno a la construcción del conocimiento verificable y replicable. Cuando el estudiante de pregrado y aún en menor medida el de posgrado desconocen la importancia de la génesis y el análisis de las implicaciones de un método termina reproduciendo mecánicamente los postulados y teorías que se ven reflejadas en la heurística de un proyecto de investigación. No solo hay ausencia de una actitud crítica en la elaboración de un proyecto de investigación, sino que hay desconocimiento de las políticas públicas en lo referente a los recursos financieros disponibles, ya que los proyectos están siendo controlados por los impactos ambientales y el respeto a los derechos humanos en diferentes ámbitos económicos.

En este marco sociopolítico donde los valores de respeto a la naturaleza y a los grupos humanos son los criterios definitorios para la aprobación de recursos financieros, la cuestión a plantear consiste en ¿qué importancia adquieren los proyectos orientados a predecir comportamientos que armonicen la axiología de las políticas públicas?

En este contexto, el artículo en cuestión intenta recuperar la parte crítica del origen del método cuantitativo para desmitificar los abusos a los que ha conducido observar al mundo como una imagen que crece y decrece según medida en donde el investigador, con la herramienta de las matemáticas (en específico las estadísticas) se ha convertido en un gurú o teólogo medieval que predice cualquier fenómeno.

Para revertir esta valoración negativa producida por los métodos que manejan datos y cifras, como es el caso de las consecuencias del método cuantitativo, de beta positivista, se propone como objetivo dar claridad a operaciones matemáticas en donde existen datos experimentales aleatorios que presentan un comportamiento exponencial, donde la principal prioridad es linealizarlos para diagnosticar un comportamiento predictivo contrastado con la literatura existente.

La tesis central es que en la misma medida en que no existe un solo procedimiento matemático para resolver la linealización de ecuaciones exponenciales, sino que existe una pluralidad de procedimientos para resolver problemas de predicción; en esta medida el abuso de valorar a los datos por arriba de las experiencias humanas depende de la orientación de la comunicación que se genere en las ciencias.

En esta tesis se esgrimen argumentos de la filosofía de la ciencia para la discusión central acerca del mundo como un laboratorio sujeto a proceso así como las consecuencias negativas de un tipo de comunicación científica que reduce al mundo, a partir de los llamados "datos duros", a un mundo inanimado, carente de vida.

Para revertir estas consecuencias negativas se recaba la literatura actual sobre el tema en cuestión y se contrasta con el libro especializado para dar cuenta si las bases de datos experimentales y la academia tributan o no de la visión negativa acerca de los llamados "datos duros" o por el contrario adoptan en su justa medida la noción de aproximación que da margen al paradigma de la complejidad para entender el cosmos, la historia y sobre todo las cosas humanas como son los datos experimentales que son falibles a la capacidad de la mente humana para comprender su realidad.

Marco teórico.

Existe un amplio debate en lo que se refiere a la pertinencia de las metodologías cuantitativa y cualitativa que no se resuelve en la heurística de un proyecto de investigación, sino que trasciende a éste, es decir pertenece a los problemas filosóficos sobre si este universo tiene una naturaleza acrática que resulta inútil medirlo (Callejo y Gómez, 2015, pp. 89 ss) o bien "la naturaleza obra según un principio organicista en cuanto proceso de perfeccionamiento" (Whitehead, 1956, pp. 8 ss) que crece y decrece según un logos medible.

Ambas posturas filosóficas (naturaleza acrática y logos que crece y decrece según medida) aún perviven en los paradigmas científicos contemporáneos.

Por ejemplo, el paradigma de la complejidad (Morin, 2008, pp. 45 ss) admite que existen grados de incertidumbre aceptables para medir un tipo de logos que crece y decrece según tres tipos de comportamiento: azaroso, cíclico o inducido por un tipo de regularidad impuesta por el hombre.

Ante esta situación, el debate se ha reducido a una crítica de la epistemología taoísta en contra de la epistemología heraclitiana en el sentido de que la naturaleza tiene grados de azar como posibilidad real de las cosas para darse libertad de asociación que van desde las partículas subatómicas hasta la dispersión de los grupos sociales. Lo mismo sucede con los ciclos naturales de este planeta que coinciden con los ciclos biológicos de las comunidades orgánicas, es decir, existe un fuerte cuestionamiento en contra de las epistemologías procesales.

La idea de proceso proviene del derecho alemán del siglo XVIII, donde proceso significaba sometimiento a juicio de un acto humano, más tarde con Kant la idea de proceso de la razón significaba someter a la razón a su propio juicio, a una especie de autolegislación para que la experiencia fuera debidamente categorizada sin la presunción de una razón desprovista de realidad (Aguilar, 2016, 71ss).

Sin embargo, los abusos acerca de la idea de proceso tuvieron lugar en el siglo XIX y XX ya que los científicos sociales identificaron el proceso con la evolución del cosmos, la historia y las cosas.

Entiéndase con esta palabra [proceso] lo que Adorno-Horkheimer llamaban Aufklärung, Nietzsche Nilismus, Heidegger Nilismus y Metaphysik, Marx le llamaba Kapital, Monsieur Homail llamaba progres, Guéunon llamaba régne de la quantité, Freud llamaba Unbehagen der Kultur, y Spengler (así como Wittgenstein) llamaba Zivilisation. Y se trataba también del lento movimiento del absolute Wissen descrito por Hegel ("porque el ello debe penetrar y dirigir toda la riqueza de la sustancia"). Esto significa recortar dentro de la historia global una figura de la historia occidental, dentro de la cual se desarrolla una secuencia de hechos y transformaciones, en condiciones de laboratorio- (Calasso, 2000, p. 224)

Con estas múltiples direcciones de la palabra proceso se propició un reduccionismo ontológico-epistemológico que "consiste en disminuir o estrechar el ser de los fenómenos y su conocimiento a una forma simple y sencilla de concebir la diversidad y complejidad de la realidad que afecta la compresión integral del objeto de investigación al producir falacias o seudo concreciones que generan endebles resultados de investigación científica" (Guadarrama, 2018, p. 26). Pero no solo el abuso de la palabra proceso crea seudo concreciones sino, sobre todo, dice Calasso: "paradojas: para que todo fuera proceso, todo tenía que convertirse en cosa. Cosa es aquello que se puede disponer; proceso es una fuerza capaz de disponer de cualquier cosa. Y para que todo llegara a ser cosa, todo debía ser definible, delimitable, en fin separable del todo." (2000, p. 277)

Lo anterior trajo como consecuencia una rivalidad de paradigmas que hablaban acerca del postulado según el cual existe un tipo de realidad unificada, tal es el caso del compromiso epistémico del paradigma holista, mientras por otro lado, el paradigma positivista aún sigue asumiendo la existencia de una realidad en sí por medio de la separación del objeto de estudio respecto al sujeto cognoscente.

La discusión se centra en la regularidad empírica que "(...) expresa una relación entre variables con un alto contenido observacional" (Delle, et al, 2005, pp. 42) y que puede medir aparentes anomalías de un sistema o ser parte de un hallazgo en una porción de realidad determinada a partir de un análisis de datos, es decir se asume una porción de

realidad intervenida por acción humana y esta porción de realidad tiene la capacidad de autorregularse (visión holística) o por el contrario se requiere de un tipo de proceso que ordene valores y datos para intervenir en él (visión positivista).

Mientras la visión holística apuesta por una actitud ética, la postura positivista acepta un tipo de intervención que no necesariamente es ético sino instrumental y pragmático. Esto último ha causado críticas severas en contra de las consecuencias de la metodología cuantitativa en el sentido de que los datos no hablan porque su lenguaje es el que le otorga la teoría. Al respecto, dice Delle: "Lo que pretende hacer pasar por "datos objetivos" y neutrales es simplemente producto de concepciones teóricas y presupuestos axiológicos que, en la mayoría de los casos, ni siquiera son planteados explícitamente" (pp. 15) por los investigadores.

El abuso de la metodología cuantitativa se ha puesto en cuestión debido a la orientación de las políticas públicas apegadas a derechos humanos y en el peor de los casos es que el universo regido por los números y las relaciones de valores reduce a la ciencia a una imagen del mundo, carente de vida.

En este sentido, la pertinencia que cobra aquí la linealización de ecuaciones exponenciales consiste en demostrar que dicho abuso y reducción de la visión de la ciencia a una imagen del mundo no depende de las operaciones matemáticas en sí, ni de la metodología cuantitativa, sino de la comunicación de los datos arrojados y sobre todo de la orientación cognitiva que la ciencia ha utilizado en la idea de proceso o secuencia para ordenar una porción de realidad que es accesible para la mente humana sin que necesariamente se la realidad en sí como la crítica contra el positivismo ha demostrado (Guadarrama 2018, pp. 117 ss).

Así por ejemplo, en los libros especializados que instruyen a los investigadores en ciernes los autores y editores apelan a una formación teórica versada en filosofía de las ciencias para realizar los ejercicios sobre aproximación de funciones como si se tratará de implementar operaciones matemáticas en un campo determinado orientado por un pragmatismo ingenuo que ya no es posible en las actuales condiciones socioeconómicas reales, obviando en todo momento que la carga interdisciplinaria cada vez ejerce mayor influencia en una academia determinada como podría ser la academia de matemáticas.

Por tal motivo, lo que interesa aquí es contribuir a dar claridad a operaciones matemáticas en donde existen datos experimentales aleatorios que presentan un comportamiento exponencial, donde la principal prioridad es linealizarlos para diagnosticar un

comportamiento predictivo en proyectos ajustados a recursos limitados en la práctica real en la aprobación de proyectos.

Marco metodológico.

Se consultó al azar en la base de datos Gooogle Scholar para referir tres fuentes bibliográficas y una fuente de libro especializado (ver tabla 1) con el propósito de contrastar los métodos de linealización para diagnosticar un comportamiento predictivo para datos experimentales. Específicamente se desarrolló la ecuación de mínimos cuadrados propuesta por Hurtado y Domínguez (2019, pp. 447) quien deja la ecuación abierta para la fundamentación no sólo teórica del concepto de aproximación (matemáticamente demostrable) sino las variantes que puede haber para abordar la linealización de ecuaciones exponenciales sin que se acepte dogmáticamente un solo procedimiento.

Tabla 1.

Recabación de fuentes bibliográficas.

Años	Dossier	Artículo (Colombia)	Artículo (México)	Libro
Sf	Aproximación por mínimos cuadrados.			
2014		Estimación de incertidumbre		
2015			Aplicación del método de los mínimos	
2019				Métodos numéricos

Fuente: propia

En lo que se refiere al dossier (Rodríguez, sf), se trata de un documento con orientación académica aplicado en la UAEM con el propósito de facilitar a los estudiantes la sencillez para la aproximación de mínimos cuadrados sin conexión con los datos experimentales de un proyecto de investigación previamente aprobado.

El artículo "Estimación de incertidumbre para aforo de tanques y carrotanques basado en ajuste por método de mínimos cuadrados lineales" (Macana, et alt, 2014) desarrollado por

el Instituto de Metodología de Colombia, se plantea un método de interpolación óptima por ajuste de mínimos cuadrados lineales, el cual es validado utilizando datos experimentales de estudios previos en tanques horizontales, es decir que se trata de una publicación postproyecto.

Mientras que el artículo editado por la UNAM (Díaz, et alt, 2015) "Aplicación del método de los mínimos cuadrados para la obtención de los parámetros de los modelos de Henderson y Chung-Pfost" desarrolla modelos matemáticos que predigan los puntos de equilibrio de humedad de los materiales higroscópicos que habitualmente se transportan, y la explicación de la obtención de los métodos de cálculo de los parámetros mediante regresión lineal de los mínimos cuadrados da una comprensión complementaria, lo cual sugiere que se trata de un proyecto debidamente aprobado.

Por último, en el libro de Hurtado y Domínguez, 2019, pp. 433 se toma la matemática correspondiente en base a los logaritmos naturales, se busca la solución de un ejercicio en base a las siguientes operaciones:

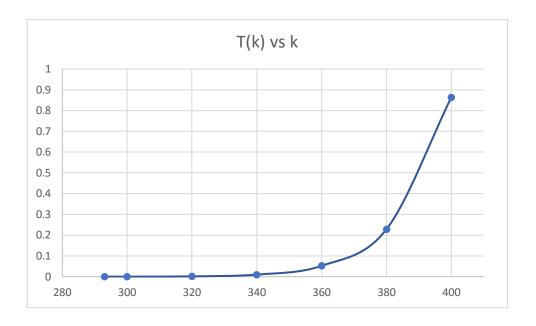
En el estudio de la constante de velocidad κ de una reacción química a diferentes temperaturas se obtuvieron los siguientes datos:

T(k)	293	300	320	340	360	380	400
κ	8.53x10 ⁻⁵	19.1x10 ⁻⁵	1.56×10^{-3}	0.01	0.0522	0.2284	0.8631

Calcule el factor de frecuencia z y la energía de activación E, asumiendo que los datos experimentales siguen la ley de Arrhenius.

$$\kappa = ze^{\frac{-E}{1.98\,T}}$$

Gráfico de datos experimentales



Linealización de relaciones no lineales.

$$\kappa = ze^{\frac{-E}{1.98\,T}}$$

A la ecuación anterior se aplica logaritmo natural para iniciar el proceso de linealización.

$$In(\kappa) = In(z * e^{\frac{-E}{1.98 T}})$$

Aplicando la siguiente propiedad de logaritmo natural In(a * b) = In(a) + In(b), resulta:

$$In(\kappa) = In(z) + In(e^{\frac{-E}{1.98 T}})$$

Como In e = 1, se obtiene:

$$In(\kappa) = In(z) + \left(-\frac{E}{1.98T}\right)$$

$$In(\kappa) = In(z) - \left(\frac{E}{1.98T}\right)$$

Utilizando una operación con fracciones se obtiene

$$In(\kappa) = \frac{1.98 * T * \ln(z) - E}{1.98 * T}$$

Realizando el despeje correspondiente se obtienen la siguiente ecuación, donde $y = 1.98 * T * In(\kappa)$, $a_0 = -E$, $a_1 = 1.98 * T$, x = In(z)

$$1.98 * T * In(\kappa) = -E + 1.98 * T * In(z)$$

$$y = a_0 + a_1 x$$

2021-2. Vol. 6, "Ajuste lineal por mínimos cuadrados de funciones exponenciales en datos experimentales", Jose Manuel Torres Valencia, pp. 22-34.

Para para localizar a_0 y a_1 se aplica ajuste por mínimos cuadrados, formulando el resultado en forma matricial.

$$\begin{bmatrix} m & \sum xi \\ \sum xi & \sum xi^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum yi \\ \sum xi * yi \end{bmatrix}$$

Se procede a obtener las sumatorias solicitadas en Excel.

i	Х	Υ	x^2	x*y	
1	580.14	-5435.5266	336562.42	-3153366.4	
2	594	-5089.681	352836	-3023270.5	
3	633.6	-4095.0008	401448.96	-2594592.5	
4	673.2	-3100.2006	453198.24	-2087055	
5	712.8	-2104.6652	508083.84	-1500205.3	
6	752.4	-1111.0366	566105.76	-835943.92	
7	792	-116.60198	627264	-92348.767	
Total	4738.14	-21052.713	3245499.22	-13286782	

Sustituyendo los valores solicitados de la forma matricial resulta:

$$\begin{bmatrix} 7 & 4738.14 \\ 4738.14 & 3245499.22 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -21052.713 \\ -13286782 \end{bmatrix}$$

Utilizando la técnica de eliminación de Gauss se obtiene:

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -20005.3984 \\ 25.11219093 \end{bmatrix}$$

Donde:

$$a_1 = -E$$

$$a_2 = In(z)$$

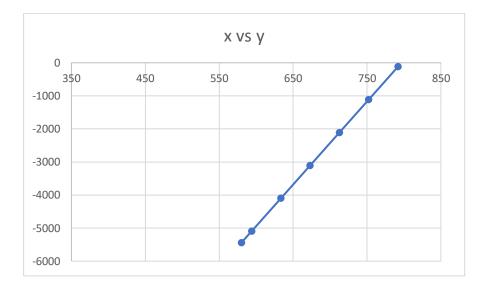
Por lo tanto

$$E = 20005.3984$$

$$z = e^{25.11219093} = 80553784468$$

Se obtuvieron las incógnitas, quedando la ecuación de la siguiente forma:

$$\kappa = 80553784468 * e^{\frac{20005.3984}{1.98 \, T}}$$



Coeficiente de correlación

Se presenta un juste perfecto donde el calculo de r=1, significa que la linealización representa el 100 % de la variabilidad de los datos y si r=0, el ajuste no presenta alguna mejora. Se procede a calcular el coeficiente de correlación

$$r = \sqrt{\frac{s_t - s_r}{s_t}}$$

$$s_t = \sum_{i=1}^n (yi - \bar{y})^2$$

$$s_r = \sum_{i=1}^n (yi - a_1 - a_2 x)^2$$

-	Se ca	lcu.	la l	as	sumatorias	requeridas	para	el	calculó	del	Coef	iciente	de corre	lación.

I	$(yi-\bar{y})^2$	$(yi - a_1 - a_2x)^2$
1	5895165.84	1.65210353
2	4335351.06	0.85368355
3	1182591.92	0.4713462
4	8587.76256	0.10828584
5	815165.618	0.58305413
6	3596688.77	0.00256012
7	8357467.07	0.00345265
Total	24191018	3.67448603

Se sustituye los valores solicitados

$$r = \sqrt{\frac{24191018 - 3.67448603}{24191018}}$$

El siguiente resultado muestra que el modelo explicó el 99.99 % de la incertidumbre original.

$$r = 0.9999$$

Discusión.

Una vez contrastadas las operaciones se observó que en el primer ejemplo del dosier de la UAEM para enseñanza superior, presenta la solución de un ejercicio del tipo exponencial, donde no hacen uso de logaritmos naturales y no desarrollan la matemática correspondiente. Además, el ajuste que presentan no tiene el cálculo de coeficiente de correlación, el cual describe que tan conveniente o no es el ajuste planteado que ayuda a describir la incertidumbre que tiene el modelo con referencia a los datos obtenidos.

En el segundo ejemplo publicado en Colombia, para el cálculo de la incertidumbre de un modelo de datos experimentales, se calcula la incertidumbre del modelo, lo cual favorece para diagnosticar que tan precisa es la aproximación. El modelo que presentan es propuesto a la desviación estándar, aquí se presenta el coeficiente de correlación que de la misma forma sirve para diagnosticar el modelo pero de una forma que ayuda a economizar el tiempo.

En la publicación de UNAM, el ajuste realizado es elaborado por un procedimiento distinto al presentado en esta publicación, donde se demuestra que no importa el modelo o procedimiento a seguir, ya que ambos cumplen la misma función encontrar un modelo que describa el fenómeno. No presenta el coeficiente de correlación, por lo que dicho cálculo favorece a describir la incertidumbre del modelo planteado.

Del libro de Hurtado y Domínguez (2019, pp. 433) se toma la matemática correspondiente en base a los logaritmos naturales, se busca la solución de un ejercicio del mismo libro y se desarrolla un procedimiento paso a paso hasta llegar al modelo, además se calcula el coeficiente de correlación un contenido que no presenta el libro y que además es proporcionado por lo que podemos concluir lo siguiente.

Conclusiones.

La literatura existente tiene como principal característica la pluralidad de soluciones en lo que respecta a la linealización de ecuaciones exponenciales, sin embargo no es consciente de los problemas epistemológicos que yacen en el fondo para la parte de la heurística de los proyectos sino que se concibe como parte de un conjunto de herramientas disponibles para las ingenierías, lo cual puede inferirse que ha sido la comunicación de resultados científicos basados en datos experimentales que aún sigue sin recoger contextos globales como son los impactos negativos en la naturaleza y las políticas públicas apegadas a derechos humanos que son los criterios decisionales para la aprobación de un presupuesto y no solo el rendimiento financiero asignado a un instituto o universidad dedicada a la investigación en ingeniería. Mientras que la bibliografía académica se encuentra aún más lejos de los problemas planteados por la epistemología y de los contextos sociopolíticos.

Esto sugiere nuevas rutas de investigación interdisciplinarias promovidas desde la parte de la formación de pregrado y por supuestos en posgrado dedicar seminarios sobre comunicación de resultados de proyectos bajo miradas multifactoriales y no solo apegados a criterios de ahorro financiero.

Bibliografía

CALASSO, R (2000). La ruina de Kash: Anagrama.

CHAPRA Y CANALE (2015). Métodos numéricos para ingenieros: Mc Graw Hill.

DELLE et al (2005). Construcción del marco teórico, formulación de lo objetivos y elección de la metodología: Clacso

HURTAO y DOMÍNGUEZ (2019). Métodos numéricos: Patria.

GUADARRAMA, P (2018). Para qué sirve la epistemología: Editorial Magisterio.

MORIN, E (2008) La mente ordenada: S. XXI.

WHITEHEAD, A (1956) Proceso y realidad: Losada.

Revistas

AGUILAR, J (2016). "El Marx del proceso" en *Theoría*, vol. 30-31, pp. 1171-190.

DOI: https://doi.org/10.22201/ffyl.16656415p.2016.30-31.459

CALLEJO Y GÓMEZ (2015). "Descripción de la realidad mente-cerebro-universo a partir de un nuevo paradigma científico y la tradición oriental: posible diálogo entre la neurociencia en Pribram y la tradición taoísta en Hallazgos", vol. 6, núm. 12, pp. 87-110.

DOI https://doi.org/10.15332/s1794-3841.2009.0012.04

RODRIGUEZ, R. (sf). "Aproximación por mínimos cuadrados" en UAEM: Dossier

http://ri.uaemex.mx/oca/bitstream/20.500.11799/33527/1/secme-18917.pdf

MACANA, et alt (2014). "Estimación de incertidumbre para aforo de tanques y carrotanques basado en ajuste por método de mínimos cuadrados lineales" en *Simposio de Metrología*, pp 1-6.

DIAZ, et alt (2015). "Aplicación del método de los mínimos cuadrados para la obtención de los parámetros de los modelos de Henderson y Chung-Pfost" en *Educación Química*, pp.139-145.