

# Tratamiento de las incertezas en la medición.

## Repaso y algo más...

*The test of all knowledge is experiment. Experiment is the sole judge of scientific ‘truth’.*

Richard Feynman  
Lectures on Physics 1966

# Tratamiento de las incertezas en la medición.

## Repaso y algo más...

Bibliografía:

- ❖ **Measurements and their Uncertainties. A practical guide to modern error analysis.** IFAN G. HUGHES, THOMAS P. A. HASE, Oxford, 2010.
- ❖ **An introduction to error analysis: the study of uncertainties in physical measurements, 2nd edition**, John R. Taylor, University Science Books, Sausalito CA, 1997.
- ❖ Presentaciones de los profesores previos de Exp.II Julio Guimpel y Alejandro Butera

*Elin Winkler,  
Lab. de Resonancias Magnéticas  
[elin.winkler@ib.edu.ar](mailto:elin.winkler@ib.edu.ar)*

# Repaso

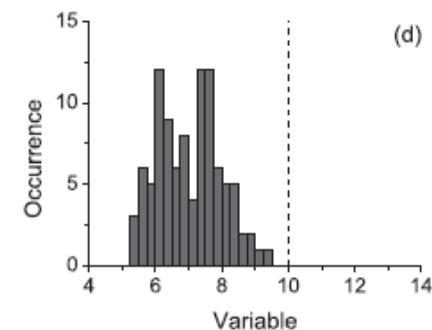
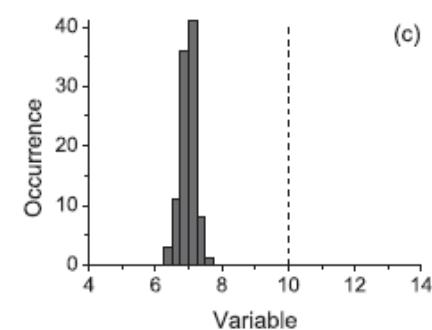
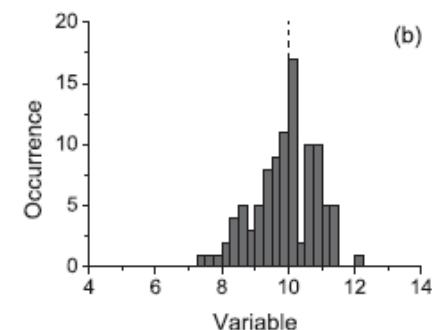
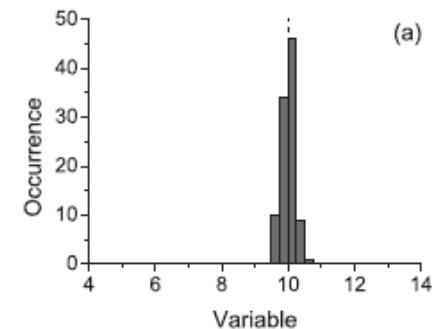
Definiciones:

**Precisión:** La dispersión de los valores medidos es “pequeña” con respecto a la variable que se mide.

**Exactitud:** Los resultados del experimento están de acuerdo con el valor aceptado o calculado de la variable medida.

En función de esto podemos clasificar:

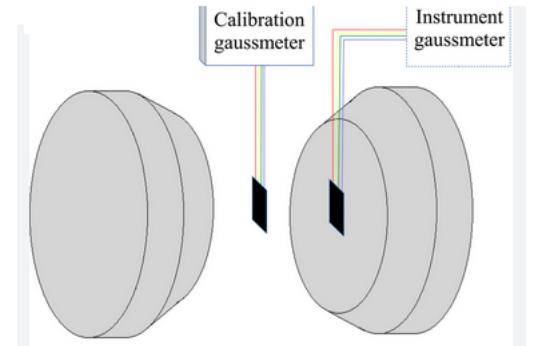
- errores **aleatorios**: influyen en la **precisión**.
- errores **sistemáticos**: influyen en la **exactitud**.
- equivocaciones**: por ej. Leer mal una escala, mal cambio de unidades, anotar mal un dato, etc.



## -Errores aleatorios:

Influyen en la **precision**

Trataremos en forma estadística



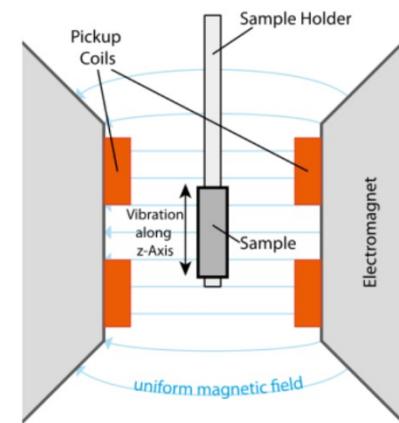
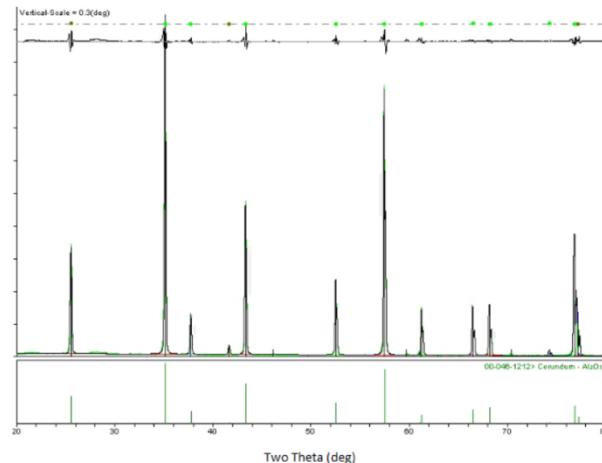
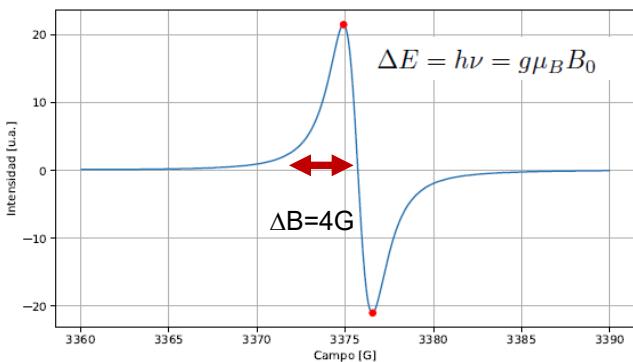
## -Errores sistemáticos:

influyen en la **exactitud**.

No existen técnicas estadísticas estándar para cuantificar los errores sistemáticos.

**Muy importante las calibraciones!**

Calibrar medición campo



$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \propto M$$

Muestra patrón para  
alinear el difractómetro

Figura A2: Espectro de EPR de la muestra de DPPH y sus picos de intensidad.

# Equivocaciones: Ojo con las unidades

**CNN.com**

[sci-tech](#) > [space](#) > [story page](#)

 banner

[MAIN PAGE](#)  
[WORLD](#)  
[U.S.](#)  
[LOCAL](#)  
[POLITICS](#)  
[WEATHER](#)  
[BUSINESS](#)  
[SPORTS](#)  
[TECHNOLOGY](#)  
[SPACE](#)  
[HEALTH](#)  
[ENTERTAINMENT](#)  
[BOOKS](#)  
[TRAVEL](#)  
[FOOD](#)  
[ARTS & STYLE](#)  
[NATURE](#)  
[IN-DEPTH](#)  
[ANALYSIS](#)  
[myCNN](#)

---

[Headline News brief](#)  
[news quiz](#)  
[daily crossword](#)

## NASA's metric confusion caused Mars orbiter loss

*September 30, 1999*  
Web posted at: 1:46 p.m. EDT (1746 GMT)

(CNN) -- NASA lost a \$125 million Mars orbiter because one engineering team used metric units while another used English units for a key spacecraft operation, according to a review finding released Thursday.

For that reason, information failed to transfer between the Mars Climate Orbiter spacecraft team at Lockheed Martin in Colorado and the mission



NASA's Climate Orbiter was lost September 23, 1999

# Equivocaciones: Ojo con las unidades

## THAT TIME A COMMERCIAL AIRCRAFT RAN OUT OF FUEL MID-FLIGHT- THE GIMLI GLIDER

May 27, 2014 | [Melissa](#) | [20 comments](#)

On July 23, 1983, in the small town of Gimli, Manitoba, Captain Robert Pearson and Co-Pilot Maurice Quintal expertly glided a 100-ton Boeing 767 carrying 69 people to a safe landing without engines, air brakes or flaps, and minimal control of the aircraft.

### Bad Math

The flight plan for Canada 143 that day began with a short jaunt from Montreal, Quebec to Ottawa, Ontario. Right from the beginning, the crew realized the plane had a **faulty fuel control**: "*A computer known as the Fuel Quantity Information System Process manages the entire fuel loading process. . . But the FQIS was not working properly on Flight 143.*"

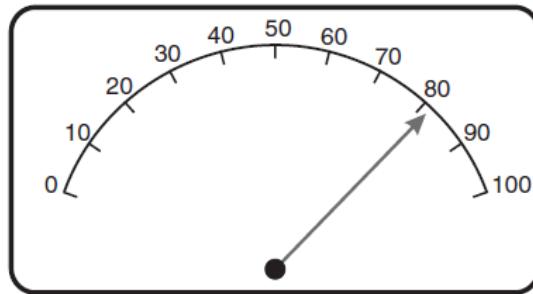
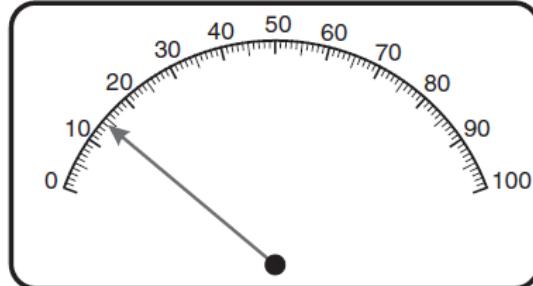
With FQIS out-of-order, the ground maintenance crew had to calculate the amount of fuel needed, in a process called "dipping the tanks."

The flight plan showed that 22,300 kilograms (49,200 lb) of fuel were required for the flight from Montreal to Ottawa to Edmonton



# Algunos consejos útiles

- Si medidas sucesivas dan exactamente el mismo valor, la precisión de la medición viene dada por la mínima escala del instrumento.
- La precisión de un **instrumento analógico** es la mitad de la escala.
- La precisión de un **instrumento digital** es un 1 en el último dígito. La exactitud depende de cuándo y cómo fue calibrado.



# Algunos consejos útiles

- Si medidas sucesivas dan exactamente el mismo valor, la precisión de la medición viene dada por la mínima escala del instrumento.
  - Si es posible elegir un instrumento con mayor precision.
- Errores aleatorios son mayores a la precision del intrumento → Tratamiento estadístico de datos.
- Si hay mediciones “raras” chequear el set-up experimental (cables y lazos de tierra!!!) y la calibración de los instrumentos. Si es posible, cambiar de instrumento.
- Apagar y prender todos los equipos. Suele solucionar varios problemas cuando se adquiere con computadora...

# Errores aleatorios en mediciones

Mido N puntos y construyo un histograma.

$\bar{x}$  centro de la distribución,  
media o promedio

$\sigma$  ancho de la distribución,  
desviación standard.

¿Cómo estimar el “ancho” cuando tenemos pocos puntos?

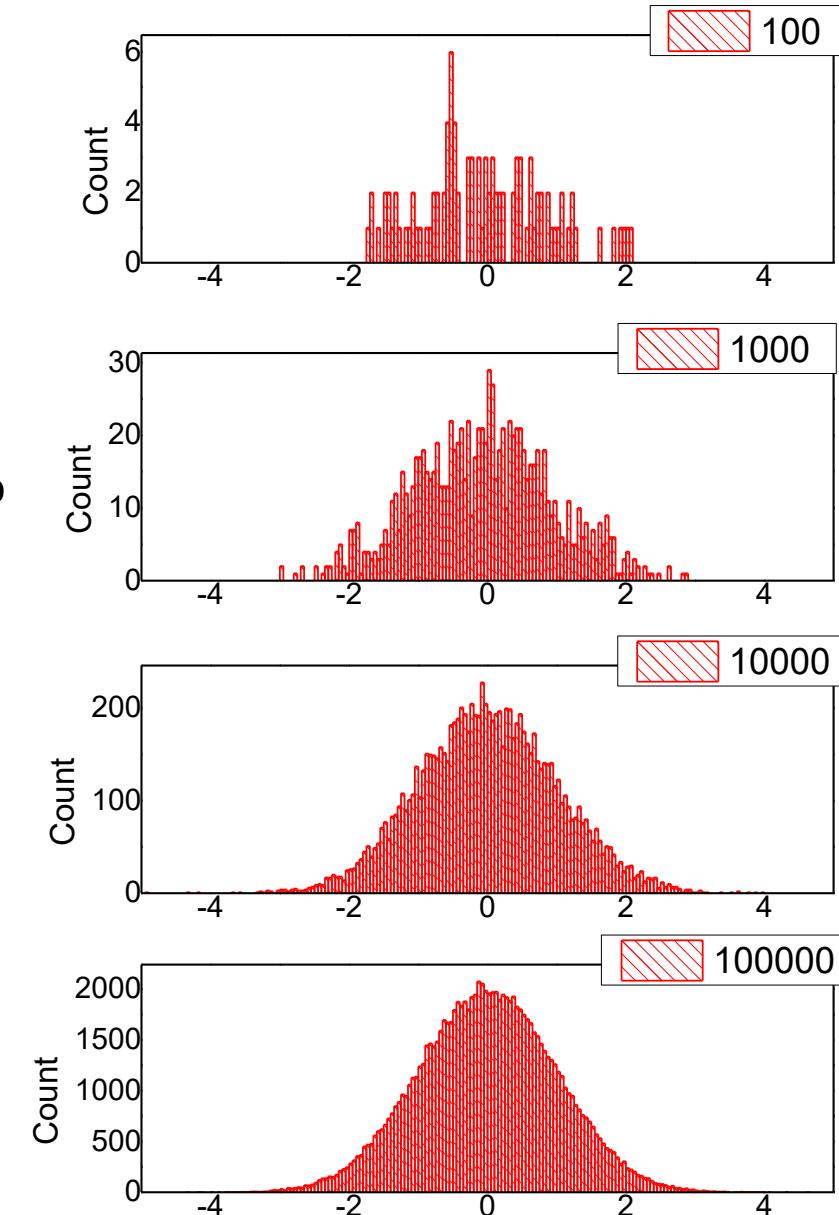
$$\sigma \sim 2/3 * (x_{\max} - x_{\min})/2$$



Para una distribución gaussiana, se espera que el 68% de los datos se encuentren dentro de la desviación estándar de la media.

Si tomo más puntos:

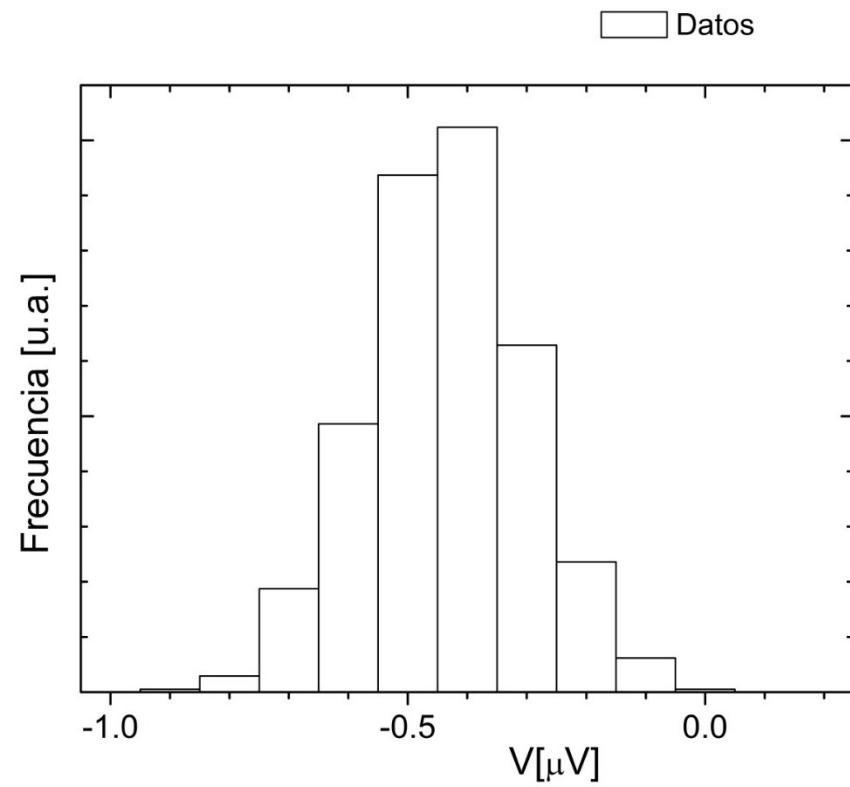
-La distribución se hace más “suave”, se puede hacer una mejor determinación del “CENTRO”, y del “ANCHO” (que NO cambian) y la INCERTEZA en la localización del CENTRO (que SÍ cambia)



# Tratamiento estadístico

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$$



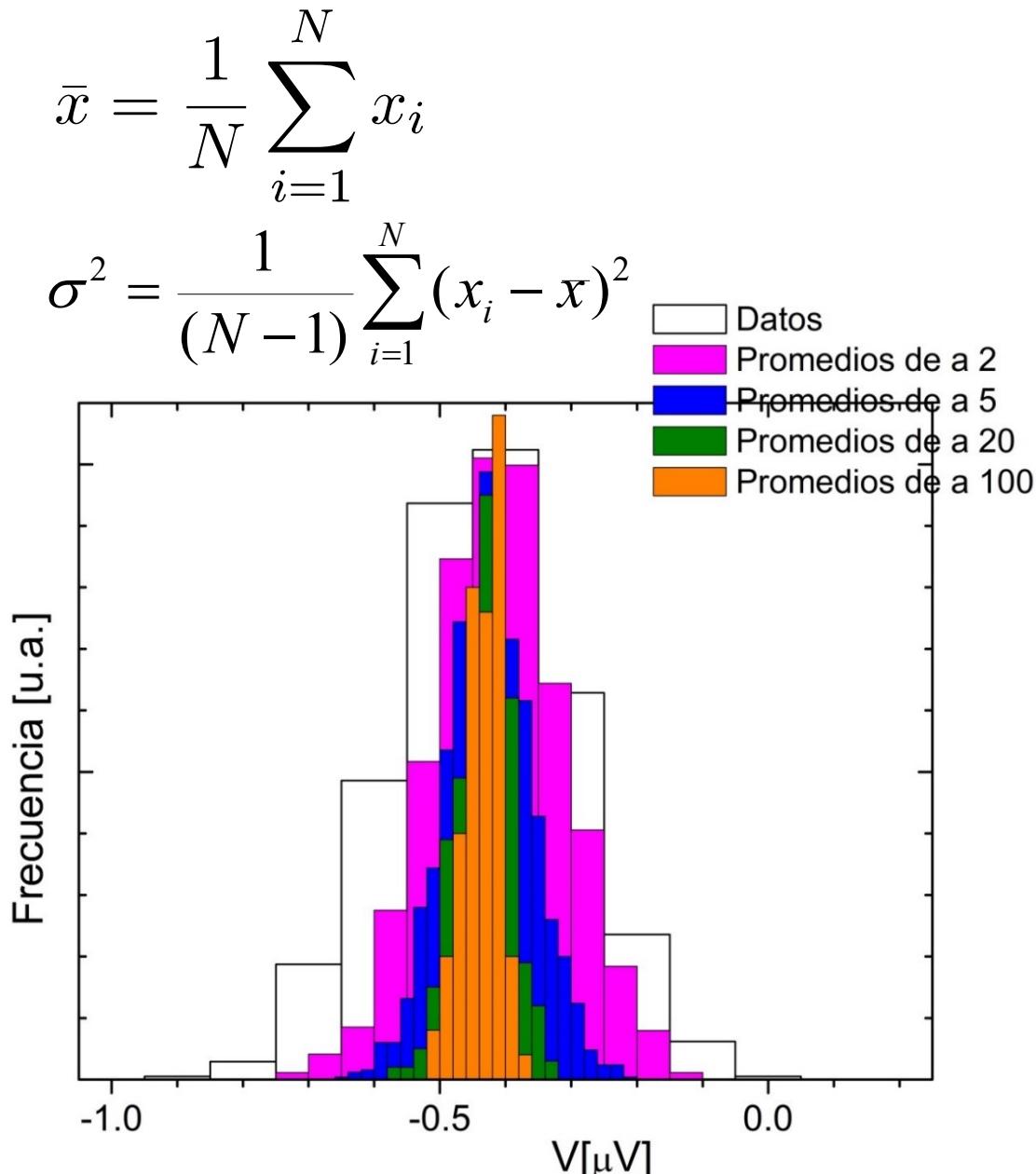
# Tratamiento estadístico

Ej: Mido una variable 9000 veces y construyo histogramas promediando datos en grupos de a  $N$ . Se observa que el histograma de los promedios también tiene distribución en forma de “campana” pero su ancho ahora depende de  $N$ .

**Desviación estandar de la media. Error estandard**

$$\alpha = \sigma_x = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

$$x \pm \alpha = x \pm \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$



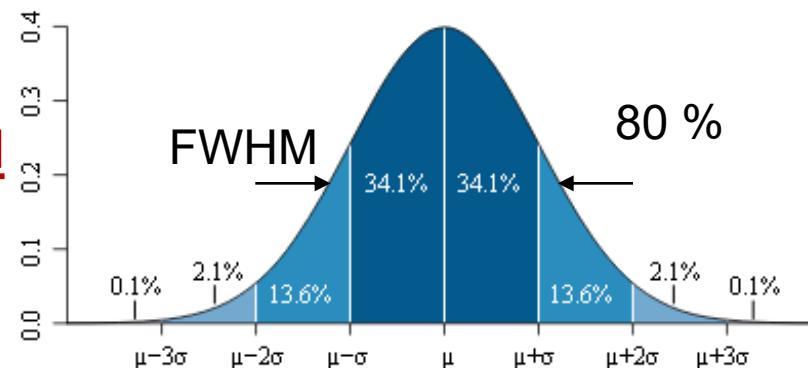
# Modelo para errores aleatorios

- El ruido es aleatorio y no correlacionado.
- El ruido es aditivo con la señal y no modifica el “valor verdadero”  $\mu$ ,  
 $x = \mu + x_r$ ,  $\langle x_r \rangle = 0$ .
- Ignoraremos la discretización introducida por el instrumento, o sea que haremos una teoría de variable continua.
- Con estas condiciones el **teorema central del límite** nos justifica utilizar una distribución de probabilidad gaussiana para la señal medida con valores “verdaderos”  $\mu$  y  $\sigma_\mu$ .

$$G(x; \mu, \sigma_\mu) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\mu} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma_\mu}\right)^2} dx$$

- $\sigma_\mu$  indica los puntos de inflexión de la curva.
- En el intervalo  $[\mu - \sigma, \mu + \sigma]$  se encuentra comprendida  $\sim 68,26\%$  de la distribución.
- Tambien se define el ancho de la Curva como el **ancho a la altura mitad** (FWHM)

$$\text{FWHM} = 2\sqrt{2\ln 2}\sigma$$



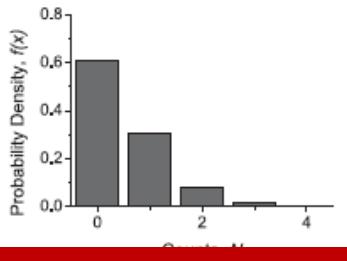
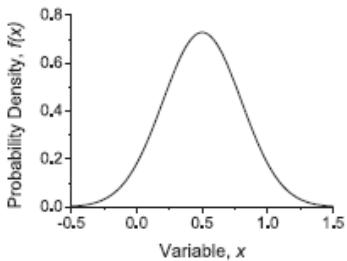
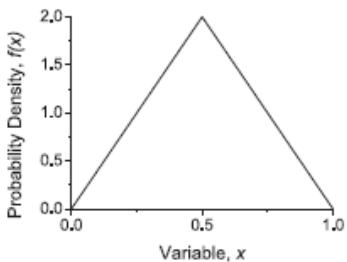
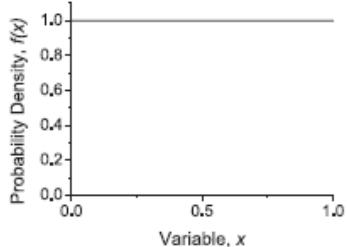
## Teorema central del límite

La suma de un gran número de variables aleatorias independientes, cada una con media y varianza finitas, tenderá a distribuirse normalmente, independientemente de la función de distribución de la variable aleatoria.

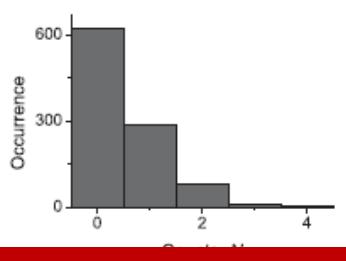
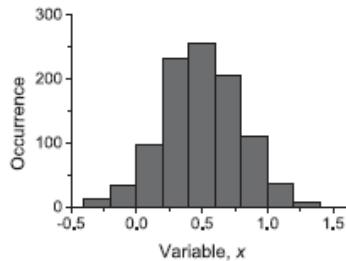
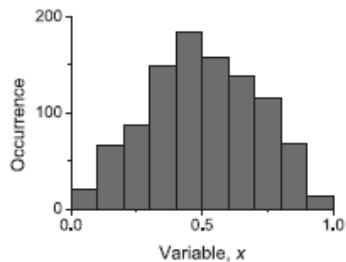
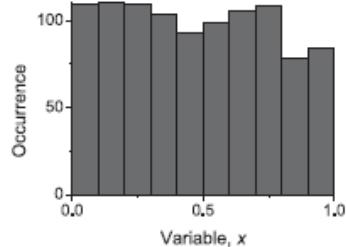
$$\sigma_x = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

### Computed generated experiments

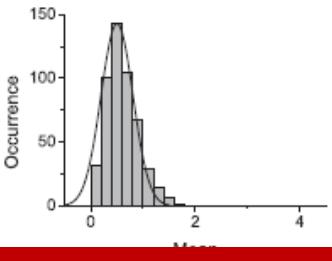
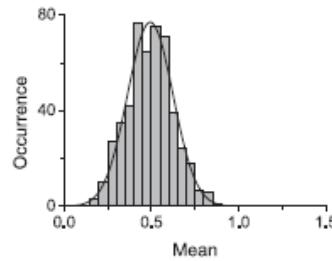
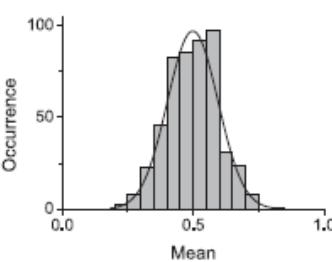
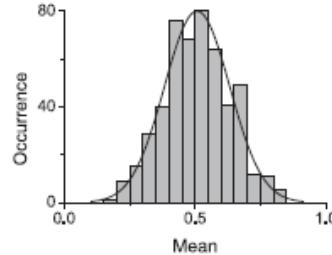
Función de distribución de probabilidades  $f(x)$



1000 datos generados en forma aleatoria a partir de  $f(x)$



Distribución de 1000 medidas donde cada punto se generó del promedio de 5 datos. Se obtiene una distribución gaussiana con desviación estándar  $\sqrt{5}$  menor que el estándar principal.



# Estrategias experimentales basadas en el análisis de las incertezas

-Si se promedian mediciones con distinta incerteza aplicar **promedios pesados (o ponderados)**

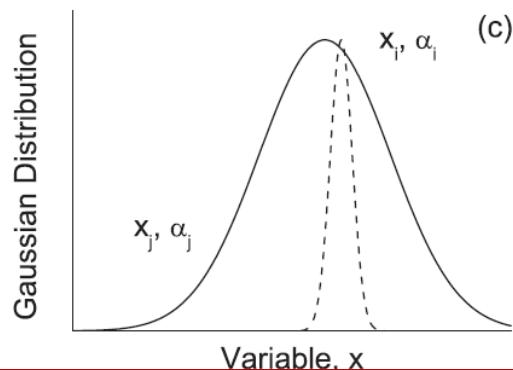
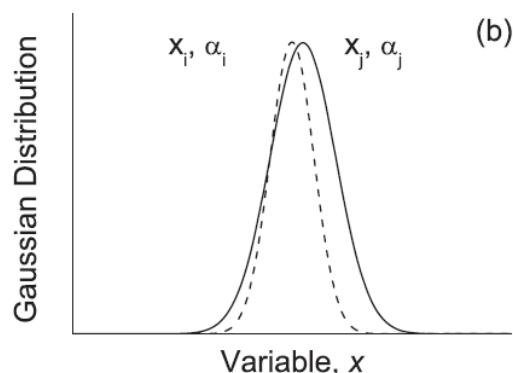
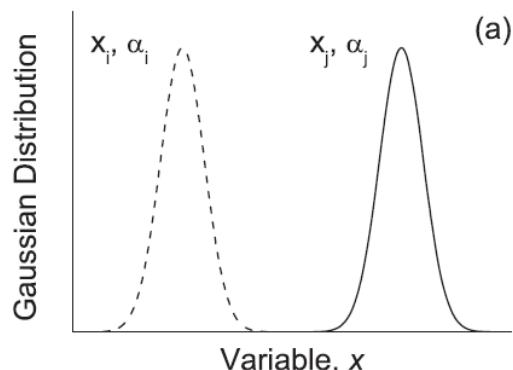
Supongamos que dos alumnos midieron una magnitud  $x$  y obtuvieron  $x_i \pm \sigma_i$  y  $x_j \pm \sigma_j$  y queremos obtener una única estimación de  $x$ .

**IMPORTANTE 1:**

El promedio tiene sentido si  $|x_i - x_j| < \sigma_i, \sigma_j$

**IMPORTANTE 2:**

El promedio tiene sentido si  $\sigma_i \sim \sigma_j$



Los “pesos”  $w_i$  de cada medición vienen definidos por:  $w_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$

En el caso de  $N$  mediciones:  $x_{av} = \frac{\sum w_i x_i}{\sum w_i}$

Y el error en el promedio puede calcularse simplemente por propagación de errores:

$$\sigma_{x_{av}}^2 = \sum \left( \frac{\partial x_{av}}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_i^2 = \frac{1}{\sum \frac{1}{\sigma_i^2}} = \frac{1}{\sum w_i}$$

**IMPORTANTE:** Ver que los pesos son proporcionales a  $1/\sigma^2$ , por lo que la contribución de las mediciones con más error es poco significativa.

En el caso particular en que los  $\sigma_i$  son todos iguales se recupera el resultado:

$$\sigma_{x_{av}} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

# Las cinco reglas de oro para reportar una medida experimental

1. El mejor estimador de un parámetro es el **valor medio**.

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

2. Se lo debe reportar con una incerteza igual a la desviación estándar del valor medio.

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$$

$$\bar{x} \pm \sigma_{\bar{x}}$$

3. El error NO debe tener más de una cifra significativa, a menos que comience con un 1.

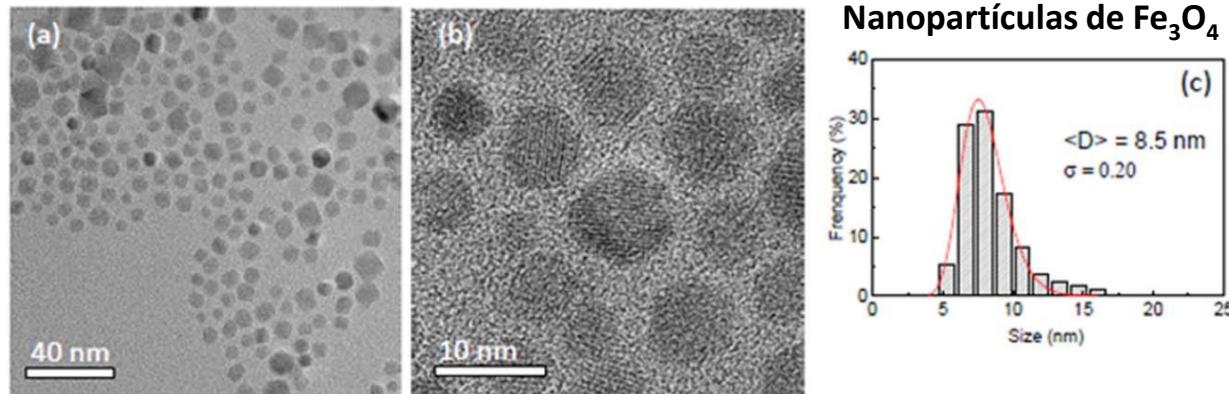
4. Hacer COINCIDIR las cifras significativas del valor medio con los de su incerteza.

→ Se debería reportar  $5000 \pm 200$  como  $(50 \pm 2) \times 10^2$ .

→ Usar  $2.23153(5)$  para reportar  $2.23153 \pm 0.00005$ .

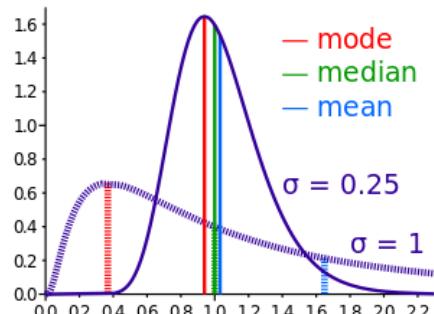
5. Incluir las UNIDADES.

# Paréntesis: En algunos casos importa determinar la distribución de una variable



Distribución de tamaño  
de nanopartículas  
Función Log-normal

$$\longrightarrow f(x, D_0, \sigma) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(lnx - D_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$



$$\text{Valor medio (Mean)} = \langle D \rangle = e^{\mu + \sigma^2/2} = D_0 e^{\sigma^2/2}$$

$$\text{Valor más Probable (Mode)} = e^{\mu - \sigma^2}$$

$$\text{Mediana} = e^\mu = D_0$$

$$\text{Varianza} = \sigma_{NPs}^2 = (e^{\mu + \sigma^2/2})^2 (e^{\sigma^2} - 1)$$

# Propagación de Incertezas

-En muchos experimentos en física se combinan variables para obtener una única magnitud.

Para el caso de una variable  $Z = f(A)$ , si quiero estimar  $Z \pm \sigma_Z$  a partir de  $\bar{A} \pm \sigma_{\bar{A}}$

Puedo usar

- MÉTODO FUNCIONAL
- MÉTODO ANALÍTICO

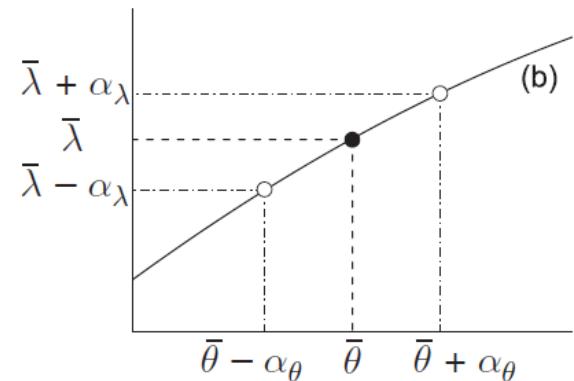
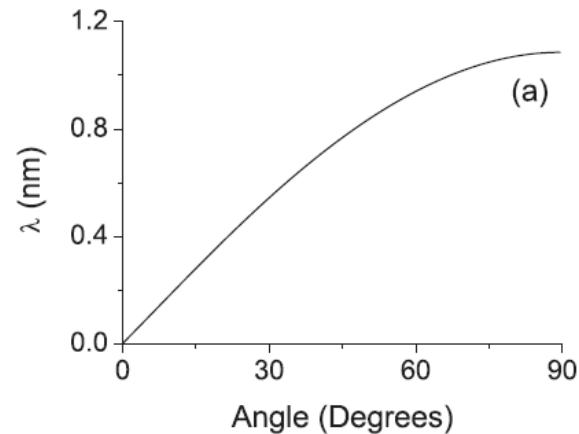
# MÉTODO FUNCIONAL

Evalúo:

$$\left. \begin{array}{l} Z = f(\bar{A}) \\ Z(+/-)\sigma_Z = f(\bar{A} + \sigma_{\bar{A}}) \\ Z(-/+)\sigma_Z = f(\bar{A} - \sigma_{\bar{A}}) \end{array} \right\} \quad \begin{aligned} \sigma_Z &= |f(\bar{A} + \sigma_{\bar{A}}) - f(\bar{A})| \\ &= \frac{1}{2} |f(\bar{A} + \sigma_{\bar{A}}) - f(\bar{A} - \sigma_{\bar{A}})| \end{aligned}$$

Notar que al evaluar  $Z=f(A)$  no necesariamente obtendremos una incertezza “simétrica”.

Se aplica si las incertezas son “pequeñas” respecto a las variaciones de la función.



# MÉTODO ANALÍTICO

Este es el método habitual de propagar incertezas y se basa en asumir que el error es pequeño de modo de poder desarrollar la función  $Z=f(A)$  en serie de Taylor alrededor del valor medio de  $A$ .

$$f(\bar{A} + \sigma_{\bar{A}}) = f(\bar{A}) + \frac{df(A)}{dA} \Bigg|_{\bar{A}} \sigma_{\bar{A}} + \dots$$

$$\Rightarrow \sigma_Z = |f(\bar{A} + \sigma_{\bar{A}}) - f(\bar{A})| = \left| \frac{df(A)}{dA} \right|_{\bar{A}} \sigma_{\bar{A}}$$

# EJEMPLO

## MÉTODO FUNCIONAL

$$\sigma_z^+ = 10^{2.4} - 10^{2.3} = 52$$

$$\sigma_z^- = 10^{2.2} - 10^{2.3} = 41$$

$$\bar{Z} = 200 \pm 50 = (20 \pm 5) \times 10^1$$

$$\bar{Z} = 200_{-40}^{+50}$$

## MÉTODO ANALÍTICO

$$\sigma_Z = \left| \frac{df(A)}{dA} \right|_{\bar{A}} \sigma_{\bar{A}}$$

$$\sigma_Z = Z \ln(10) \sigma_{\bar{A}} = 46$$

$$\bar{Z} = 200 \pm 50$$

$$Z = 10^A$$

$$\bar{A} = 2.3 \pm 0.1$$

$$\bar{Z} = 10^{2.3} = 199.5$$

Si los errores son  
“pequeños” ambos métodos  
dan resultados coincidentes

**IMPORTANTE**

**Table 4.1** Results for the propagation of errors in single-variable functions.

Function, $Z(A)$	$\frac{dZ}{dA}$	Error
$\frac{1}{A}$	$-\frac{1}{A^2}$	$\alpha_z = \frac{\alpha_A}{A^2} = Z^2 \alpha_A$ OR $\left  \frac{\alpha_Z}{Z} \right  = \left  \frac{\alpha_A}{A} \right $
$\exp A$	$\exp A$	$\alpha_z = \exp A \alpha_A = Z \alpha_A$
$\ln A$	$\frac{1}{A}$	$\alpha_z = \frac{\alpha_A}{A}$
$\log A$	$\frac{1}{\ln(10) A}$	$\alpha_z = \frac{\alpha_A}{\ln(10) A}$
$A^n$	$n A^{n-1}$	$\alpha_z = \left  n A^{n-1} \right  \alpha_A$ OR $\left  \frac{\alpha_Z}{Z} \right  = \left  n \frac{\alpha_A}{A} \right $
$10^A$	$10^A \ln(10)$	$\alpha_z = 10^A \ln(10) \alpha_A$
$\sin A$	$\cos A$	$\alpha_z =  \cos A  \alpha_A$
$\cos A$	$-\sin A$	$\alpha_z =  \sin A  \alpha_A$
$\tan A$	$1 + \tan^2 A$	$\alpha_z = (1 + Z^2) \alpha_A$

# FUNCIONES QUE DEPENDEN DE MÁS DE UNA VARIABLE.

Si las variables son INDEPENDIENTES y las incertezas están NO CORRELACIONADAS, entonces:

$$Z = f(A, B) \longrightarrow \bar{Z} = f(\bar{A}, \bar{B})$$

## MÉTODO FUNCIONAL

$$\sigma_Z^A = f(\bar{A} + \sigma_{\bar{A}}, \bar{B}) - f(\bar{A}, \bar{B})$$

$$\sigma_Z^B = f(\bar{A}, \bar{B} + \sigma_{\bar{B}}) - f(\bar{A}, \bar{B})$$

$$\sigma_Z^2 = (\sigma_Z^A)^2 + (\sigma_Z^B)^2$$

## MÉTODO ANALÍTICO

$$\sigma_{\bar{Z}}^2 = \left( \frac{\partial Z}{\partial \bar{A}} \right)_{A=\bar{A}}^2 \sigma_{\bar{A}}^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial \bar{B}} \right)_{B=\bar{B}}^2 \sigma_{\bar{B}}^2$$

Como las variables son INDEPENDIENTES, las derivadas cruzadas (covarianza) promedian cero. (Ya volveremos al caso de covarianza no nula).

**Table 4.2** Some simple rules for the propagation of errors in multi-variable functions.

Function, $Z (A)$	Expression used to calculate $\alpha_Z$
$Z = A + B$ $Z = A - B$	$\alpha_Z = \sqrt{(\alpha_A)^2 + (\alpha_B)^2}$
$Z = A \times B$ $Z = \frac{A}{B}$	$\frac{\alpha_Z}{Z} = \sqrt{\left(\frac{\alpha_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_B}{B}\right)^2}$
$Z = A^n$	$\left  \frac{\alpha_Z}{Z} \right  = \left  n \frac{\alpha_A}{A} \right $
$Z = kA$	$\alpha_Z =  k  \alpha_A \text{ OR } \left  \frac{\alpha_Z}{Z} \right  = \left  \frac{\alpha_A}{A} \right $
$Z = k \frac{A}{B}$	$\frac{\alpha_Z}{Z} = \sqrt{\left(\frac{\alpha_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_B}{B}\right)^2}$
$Z = k \frac{A^n}{B^m}$	$\frac{\alpha_Z}{Z} = \sqrt{\left(n \frac{\alpha_A}{A}\right)^2 + \left(m \frac{\alpha_B}{B}\right)^2}$
$Z = A + B - C + D$	$\alpha_Z = \sqrt{(\alpha_A)^2 + (\alpha_B)^2 + (\alpha_C)^2 + (\alpha_D)^2}$
$Z = \frac{(A \times B)}{(C \times D)}$	$\frac{\alpha_Z}{Z} = \sqrt{\left(\frac{\alpha_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_B}{B}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_C}{C}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_D}{D}\right)^2}$
$Z = \frac{(A^n \times B^m)}{(C^p \times D^q)}$	$\frac{\alpha_Z}{Z} = \sqrt{\left(n \frac{\alpha_A}{A}\right)^2 + \left(m \frac{\alpha_B}{B}\right)^2 + \left(p \frac{\alpha_C}{C}\right)^2 + \left(q \frac{\alpha_D}{D}\right)^2}$

# ESTRATEGIAS EXPERIMENTALES BASADAS EN EL ANÁLISIS DE LAS INCERTEZAS

$$Z = f(A, B)$$

-SIEMPRE concentrarse en reducir el error dominante.

Por ejemplo, si quiero estimar la incerteza en la medición de la densidad de una esfera, y he medido la masa y el radio con una precisión del 1%

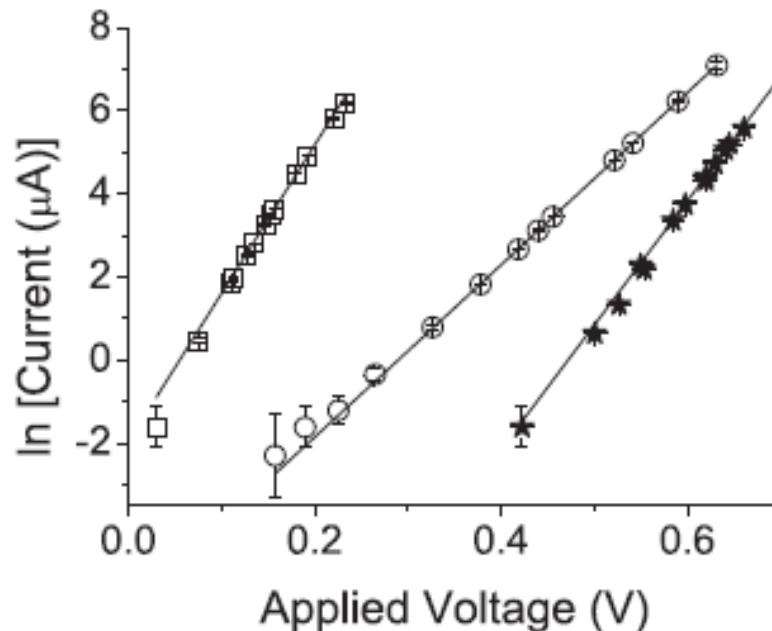
$$\rho = \frac{m}{\frac{4}{3}\pi r^3} \Rightarrow \frac{\sigma_\rho}{\rho} = \sqrt{9\left(\frac{\sigma_r}{r}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_m}{m}\right)^2} \approx 3.2\%$$

Ver que la contribución a la incerteza en la densidad es dominada por la incerteza en el radio  $r$ , por lo tanto debe ser la variable a medir con más precisión y no se justifica (en una primera instancia) mejorar la medida de  $m$ .

# Representar gráficamente las mediciones

## Guía para graficar

1. Variable independiente en el eje horizontal y la variable dependiente en el eje vertical.
2. Cuando se pueda linealizar los datos
3. Elegir escalas apropiadas
4. Nombre de las variables y unidades (entre paréntesis)
5. Datos y barras de error
6. Ajuste



**Fig. 5.1** Combining many different data sets on one graph. The forward-bias current–voltage characteristics of a silicon ( $\circ$ ), germanium ( $\square$ ) and zener ( $\star$ ) diode are depicted. A logarithmic scale was chosen for the current to emphasise the exponential growth of the current with increasing voltage.

# INSTRUMENTOS DIGITALES

Si se usan distintos instrumentos para medir una variable es importante considerar los errores de clase cuando se reportan las incertezas.

Medición de una resistencia  $V = R \times I$ :

Voltímetro clase 1000,  $V = \alpha V_{med}$  con  $\alpha = 1.000 \pm 0.001$

Fuente de I clase 10000,  $I = \beta I_{apl}$  con  $\beta = 1.0000 \pm 0.0001$

Ajusto con una recta  $V = V_{ajuste} + R_{ajuste} \times I$

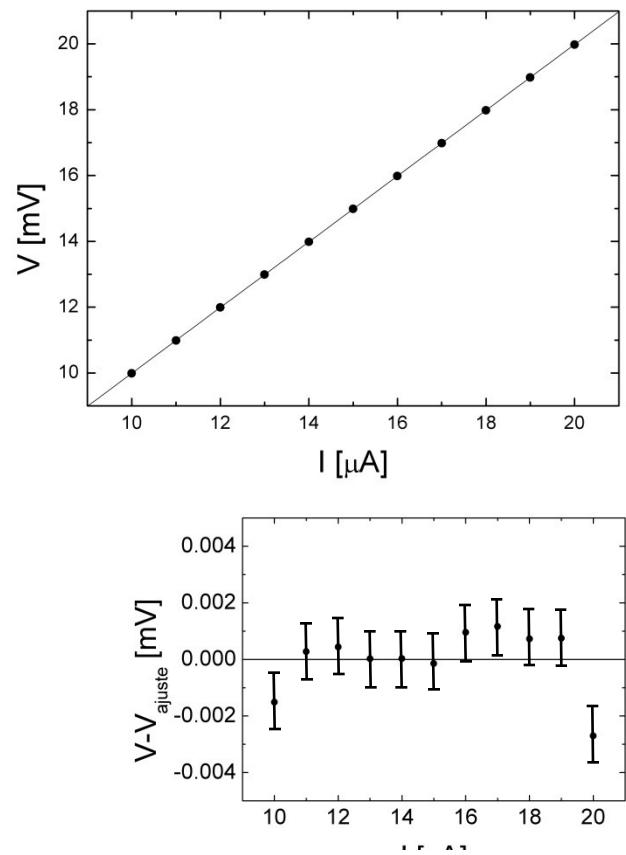
El resultado da:  $V = (1 \pm 2) \mu\text{V} + (999.0 \pm 0.1) \Omega \times I$

¿Qué valor de  $R$  y de su incerteza reporto?

Calculo  $R_{ajuste}$  en base a  $V$  medidos e  $I$  aplicados

Entonces  $R = \frac{\alpha}{\beta} R_{ajuste} = 999.0 \Omega$

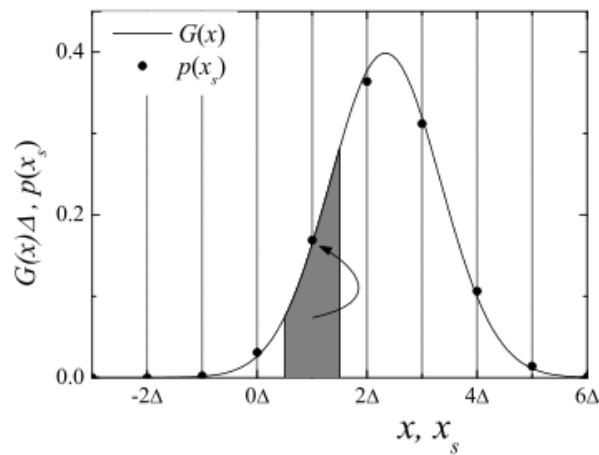
$$\begin{aligned}\left(\frac{s_R}{R}\right)^2 &= \left(\frac{s_\alpha}{\alpha}\right)^2 + \left(\frac{s_\beta}{\beta}\right)^2 + \left(\frac{s_{R_{ajuste}}}{R_{ajuste}}\right)^2 = (10^{-3})^2 + (10^{-4})^2 + (10^{-4})^2 \\ &= (10^{-3})^2 \implies s_R = 1\Omega\end{aligned}$$



MORALEJA: Tener cuidado al reportar incertezas menores a la clase del instrumento

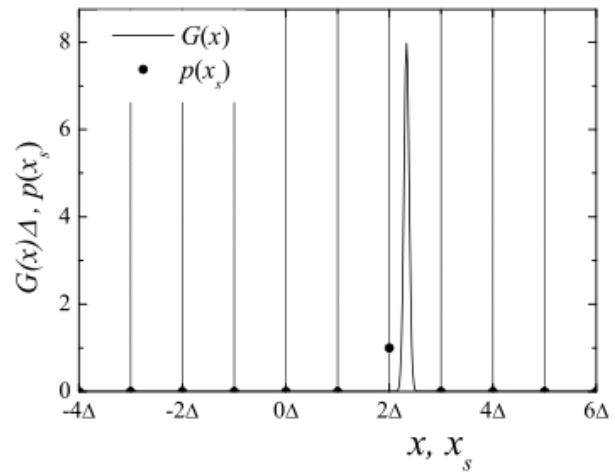
# INSTRUMENTOS DIGITALES

La teoría es de variable continua. ¿Qué hago cuando el instrumento me da un número limitado de dígitos y el ruido no es mucho mas grande que el LSB?



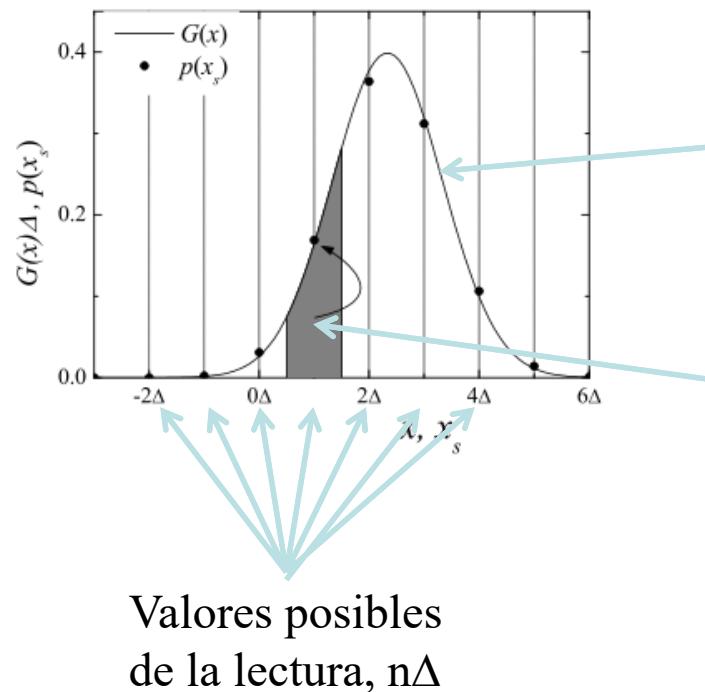
Si el ruido es muy grande comparado con el LSB, ( $\sigma \gg \Delta$ ), puedo olvidarme de la discretización y seguir trabajando con la teoría gaussiana continua.

Si el ruido es muy chico comparado con el LSB, voy a obtener siempre la misma lectura y no puedo hacer nada con estadística, solo asignar el LSB / 2 como incerteza.



# INSTRUMENTOS DIGITALES

La teoría es de variable continua. ¿Qué hago cuando el instrumento me da un número limitado de dígitos y el ruido no es mucho mas grande que el LSB (Least Significant Bit)?



$G(x, \mu, \sigma)$  es la densidad de probabilidad de que un valor exista a la entrada del instrumento.

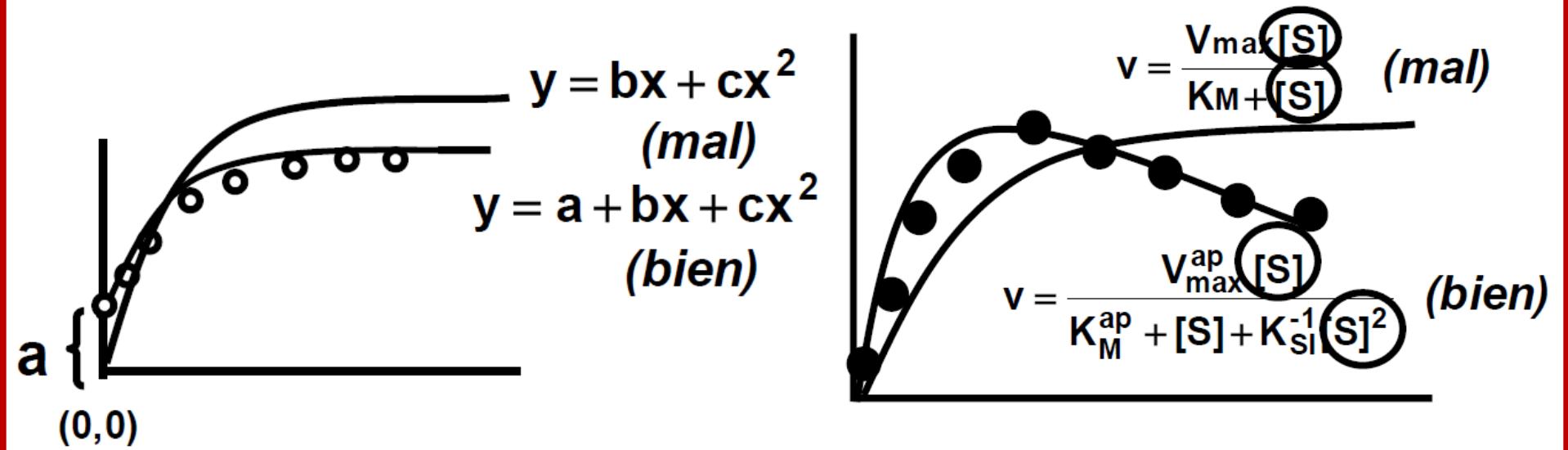
La probabilidad  $p(x_s)$  de tener esta lectura es el área sombreada en la  $G(x, \mu, \sigma)$

Solución pragmática si no quiero rehacer toda la teoría para hacerla de variable discreta ..... formulita de interpolación:

$$s_{\text{efectivo}}^2 = s_{\text{medición}}^2 + \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2$$

# ¿Qué hago con mis datos experimentales?

- Tanto para un modelo empírico como para uno teórico  $\Rightarrow$  comprobar que el tipo de curva que predice nuestra **ecuación concuerda con el comportamiento cualitativo de los datos experimentales**:

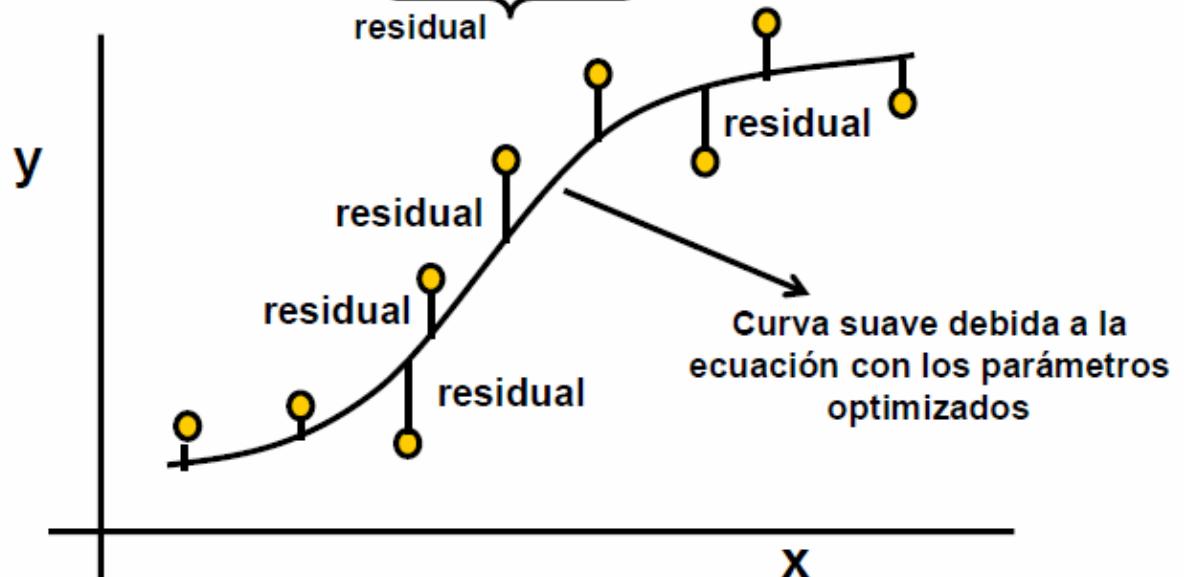


# ¿Qué hago con mis datos experimentales?

- Una vez decidido el modelo se debe buscar el mejor ajuste de la ecuación a los datos y no “ajuste de los datos a la ecuación” ⇒ hallar parámetros que mejor ajusten los datos.

Minimizar residuales al cuadrado (Mínimos Cuadrados)

$$SSQ = \sum_{\text{residual}} (y_i - f(p, x_i))^2 \quad (\text{Norma L2})$$





# Tratamiento de las incertezas en la medición.

## Repaso y algo más...

Bibliografía:

- ❖ **Measurements and their Uncertainties. A practical guide to modern error analysis.** IFAN G. HUGHES, THOMAS P. A. HASE, Oxford, 2010.
- ❖ **An introduction to error analysis: the study of uncertainties in physical measurements, 2nd edition**, John R. Taylor, University Science Books, Sausalito CA, 1997.
- ❖ Presentaciones de los profesores previos de Exp.II Julio Guimpel y Alejandro Butera

*Elin Winkler,  
Lab. de Resonancias Magnéticas  
[elin.winkler@ib.edu.ar](mailto:elin.winkler@ib.edu.ar)*

## Clase Anterior

- Medición de una variable  $x \pm \sigma_x$
- Propagación errores en una o más variables

$$Z = f(A, B) \longrightarrow \bar{Z} = f(\bar{A}, \bar{B})$$

### -MÉTODO FUNCIONAL

$$\sigma_Z^A = f(\bar{A} + \sigma_A, \bar{B}) - f(\bar{A}, \bar{B})$$

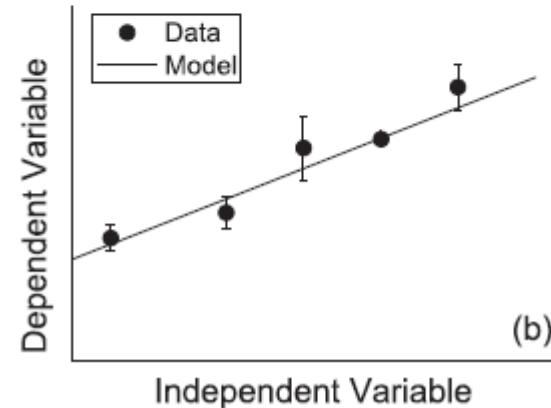
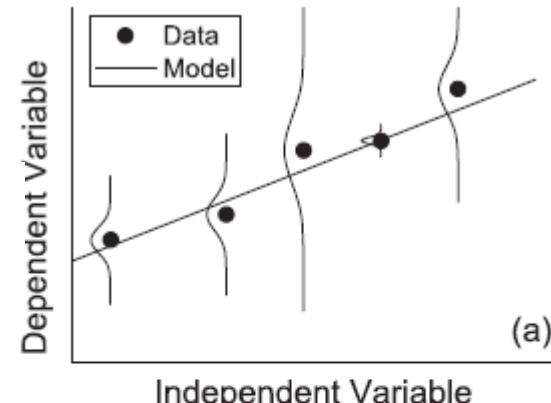
$$\sigma_Z^B = f(\bar{A}, \bar{B} + \sigma_B) - f(\bar{A}, \bar{B})$$

$$\sigma_Z^2 = (\sigma_Z^A)^2 + (\sigma_Z^B)^2$$

### -MÉTODO ANALÍTICO

$$\sigma_{\bar{Z}}^2 = \left( \frac{\partial Z}{\partial A} \right)_{A=\bar{A}}^2 \sigma_A^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial B} \right)_{B=\bar{B}}^2 \sigma_B^2$$

- Cómo reportar los errores
- Gráfico de datos



En esta clase veremos diferentes métodos de ajustes, modelos y ejemplos

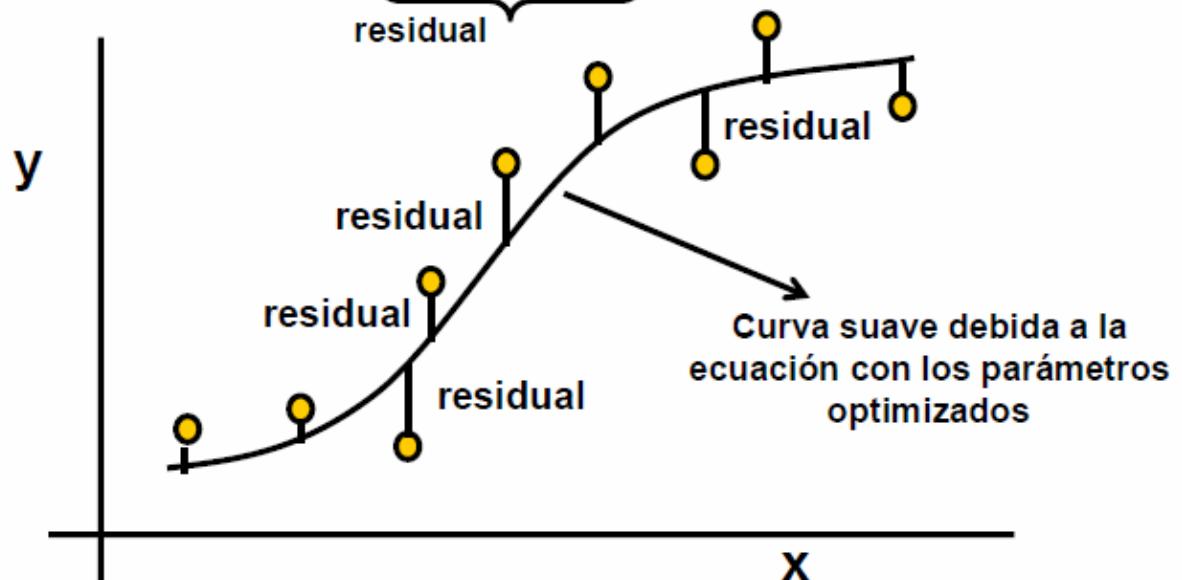
# ¿Qué hago con mis datos experimentales?

- Una vez decidido el modelo se debe buscar el mejor ajuste de la ecuación a los datos y no “ajuste de los datos a la ecuación” ⇒ hallar parámetros que mejor ajusten los datos.

Minimizar residuales al cuadrado (Mínimos Cuadrados)

$$SSQ = \sum_{\text{residual}} (y_i - f(p, x_i))^2 \quad (\text{Norma L2})$$

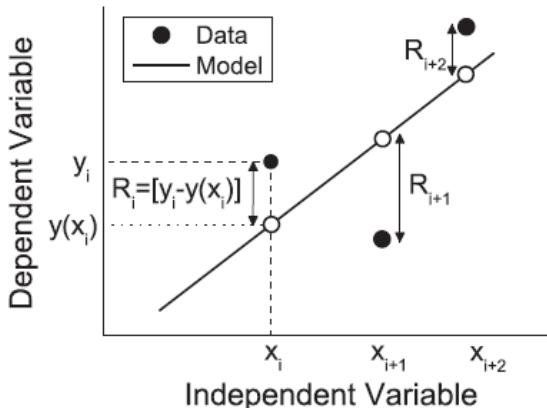
MÉTODO DE  
CUADRADOS  
MÍNIMOS



# Ajuste por Cuadrados Mínimos

## Principio de Máxima Verosimilitud

Determinar los parámetros óptimos de una función con el fin de encontrar la función que mejor ajusta los datos experimentales.



Dado un conjunto de datos  $(x_i, y_i)$ , determinar la recta  $y=mx+c$  mas próxima a los datos experimentales.

Residuo:  $(y_i - y) = y_i - m x_i + c$   
Se busca minimizar  $(y_i - y)^2$

Suponemos cada  $y_i$  tiene una distribución Gaussiana con un error estándar  $\alpha_i$ . La probabilidad de obtener el valor  $y_i$ , dados los parámetros  $m$  y  $c$ , es proporcional al valor de la función de densidad de probabilidad en  $y_i$ .

$$P_i = G_i dy_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha_i}} \exp\left[-\frac{(y_i - mx_i - c)^2}{2\alpha_i^2}\right] dy_i.$$

La probabilidad de obtener el conjunto de las  $N$  mediciones dados  $m$  y  $c$  es el producto de las probabilidades para cada medición individual:

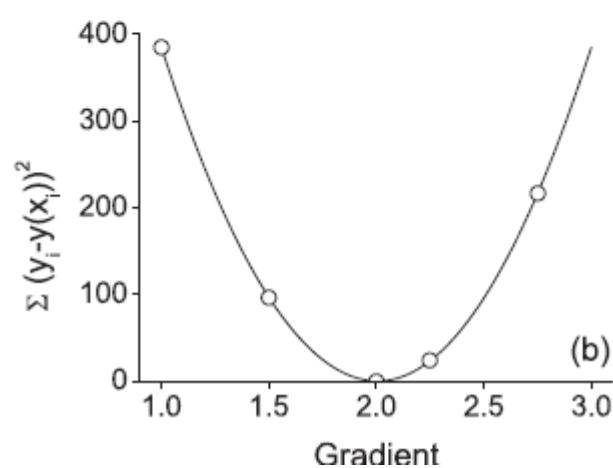
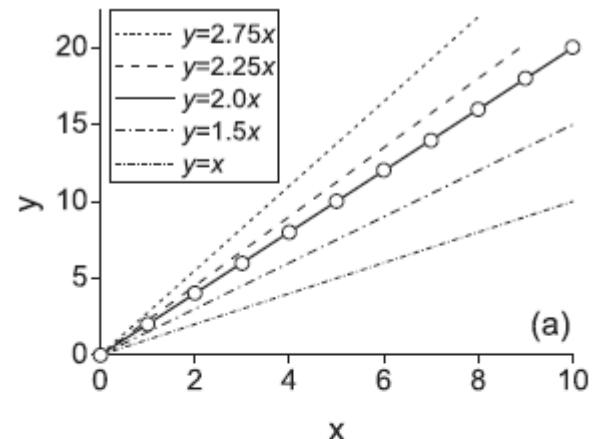
$$P(m, c) = \prod_i P_i = \prod_i \frac{dy_i}{\sqrt{2\pi\alpha_i}} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{y_i - mx_i - c}{\alpha_i}\right)^2\right]$$

El Principio de Máxima Verosimilitud (PMV): nos permite encontrar los parámetros  $m$  y  $c$  que maximiza la probabilidad

$$P(m, c) = \prod_i P_i = \prod_i \frac{dy_i}{\sqrt{2\pi\alpha_i}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_i \left( \frac{y_i - mx_i - c}{\alpha_i} \right)^2 \right]$$

Esta función se maximiza cuando se minimiza la función  $\chi^2$ .

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_i - y(x_i))^2}{\alpha_i^2},$$



# Ajuste por cuadrados mínimos

- Dado un conjunto de datos  $\{x_i, y_i\}, i=1, \dots, N$  que supondremos pueden ser representados por una función  $y=f(x, a_1, \dots, a_M)$  en base al PMV puede mostrarse que el mejor ajuste se obtiene minimizando  $\chi^2$  respecto a  $a_1, \dots, a_M$

$$\min \chi^2 = \min \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(x_i, a_1, \dots, a_M)}{\sigma_{y_i}} \right]^2$$

Si la función  $y=f(x)$  es **lineal en los parámetros**  $a_1, \dots, a_M$ , es decir  $f(x)=a_1f_1(x)+a_2f_2(x)+\dots+a_Mf_M(x)$

A partir de:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_i} = - \frac{\partial}{\partial a_i} \left[ \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - f(x_i, a_1, \dots, a_M)}{\sigma_{y_i}} \right]^2 \right] = 0$$

Y suponiendo que  $\sigma_{yi}=\sigma_{yj}=\sigma_y$ ,  
puede obtenerse un sistema de  $M$  ecuaciones con  $M$  incógnitas que se resuelve con álgebra matricial y  
permite obtener  $a_1, \dots, a_M$  y sus incertezas  
(suponiendo  $\sigma_{xi} \ll \sigma_{yi}$ )

# Ajuste con una recta

Si nuestros datos  $\{x_i, y_i\}, i=1, \dots, N$  pueden aproximarse con una recta:  $y=f(x)=A+Bx$ ,

entonces:

$$A = \left( \sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i \sum x_i y_i \right) / \Gamma$$

$$B = \left( N \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i \right) / \Gamma$$

$$\Gamma = N \sum x_i^2 - \left( \sum x_i \right)^2$$

# Ajuste con una recta

Para estimar las incertezas es muy conveniente suponer que  $\sigma_{xi}=0$  y que los  $\sigma_{yi}$  son todos iguales. De esta forma podemos propagar errores con el método analítico y llegar a:

$$s_y^2 = \frac{1}{N - 2} \sum [y_i - (A + Bx_i)]^2$$

$$s_A^2 = \frac{\sum x_i^2}{\Gamma} s_y^2$$

$$s_B^2 = \frac{N}{\Gamma} s_y^2$$

# Ajuste con una recta

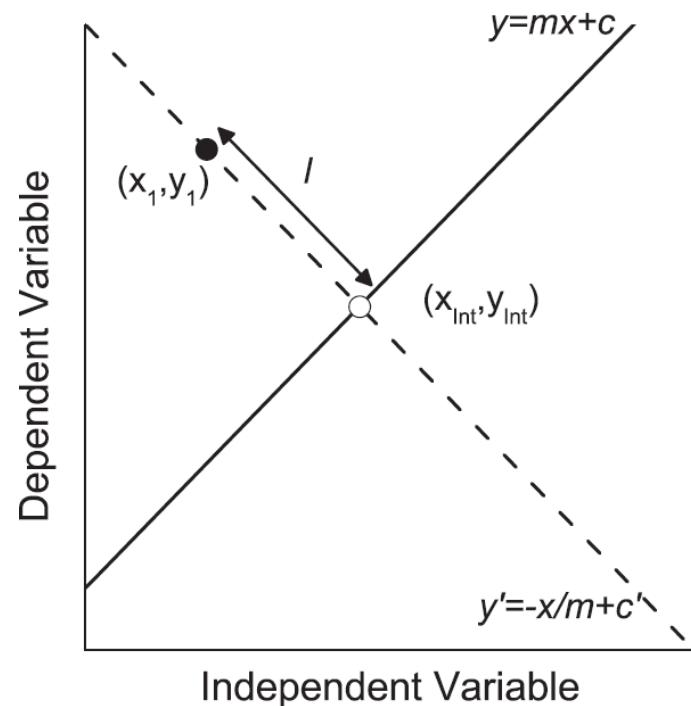
Si  $\sigma_{x_i} \sim \sigma_{y_i}$  debo considerarlo en el denominador de la función  $\chi^2 \rightarrow$  las ecuaciones dejan de ser lineales.

Consejo: siempre definir como variable independiente la de menor incerteza

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - mx_i - c)^2}{\sigma_{y_i}^2 + m\sigma_{x_i}^2}$$

Si  $\sigma_{x_i} \sim \sigma_{y_i}$  existen métodos de “regresión ortogonal” en donde se minimiza la distancia ortogonal a la función propuesta.

Libro Hughes, Hase, cap. 9



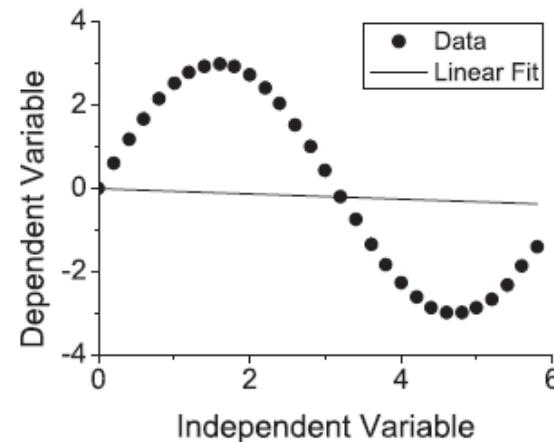
# ADVERTENCIA

- El método de cuadrados mínimos **siempre** va a resultar en un conjunto de parámetros y sus incertezas.
- Más allá de los modelos matemáticos un buen experimentador debe ser capaz de determinar si el modelo describe los datos medidos.

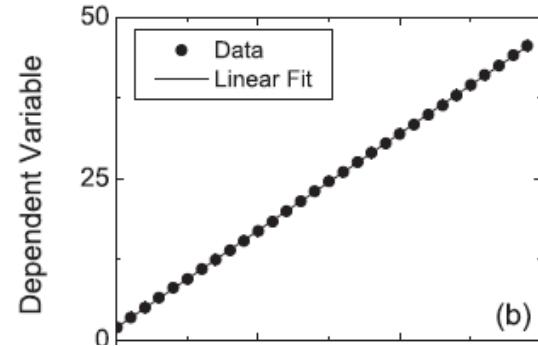
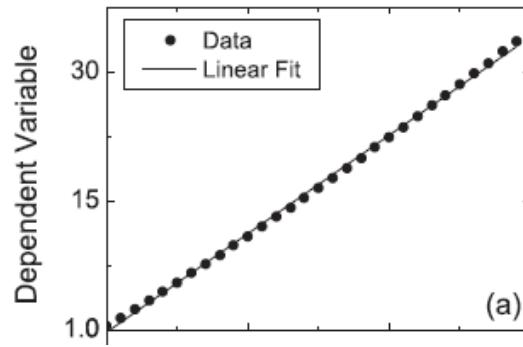


- Inspección visual
- Análisis de la curva de residuos

$$R_i = y_i - f(x_i).$$



**Fig. 5.9** The least-squares best-fit straight line to a sinusoidal variation. Error bars smaller than symbol size. **Health warning** It is possible to use the method of least squares to find the ‘best-fit’ straight line for *any* data set. This *does not* mean that a linear fit is an appropriate theoretical model.

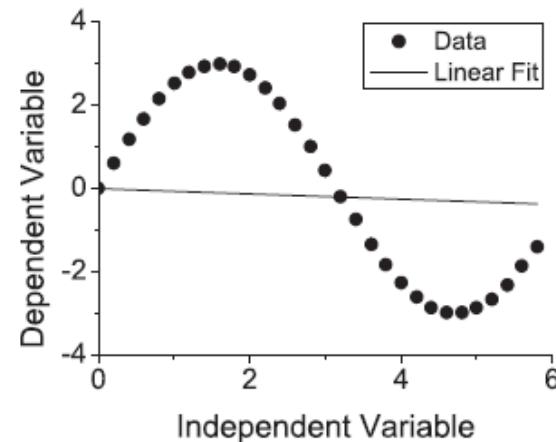


# ADVERTENCIA

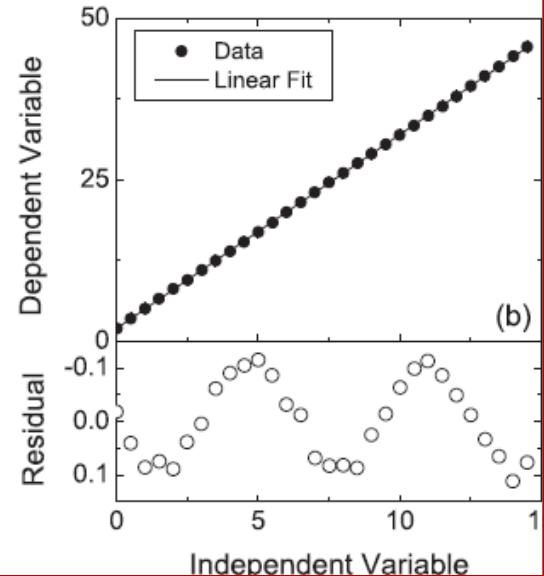
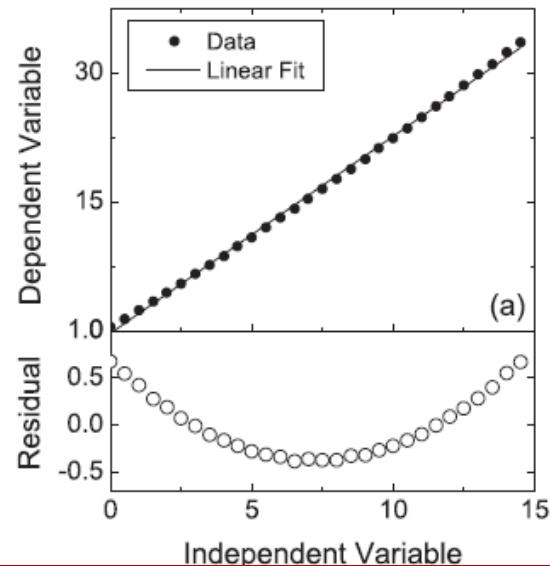
- El método de cuadrados mínimos **siempre** va a resultar en un conjunto de parámetros y sus incertezas.
- Más allá de los modelos matemáticos un buen experimentador debe ser capaz de determinar si el modelo describe los datos medidos.

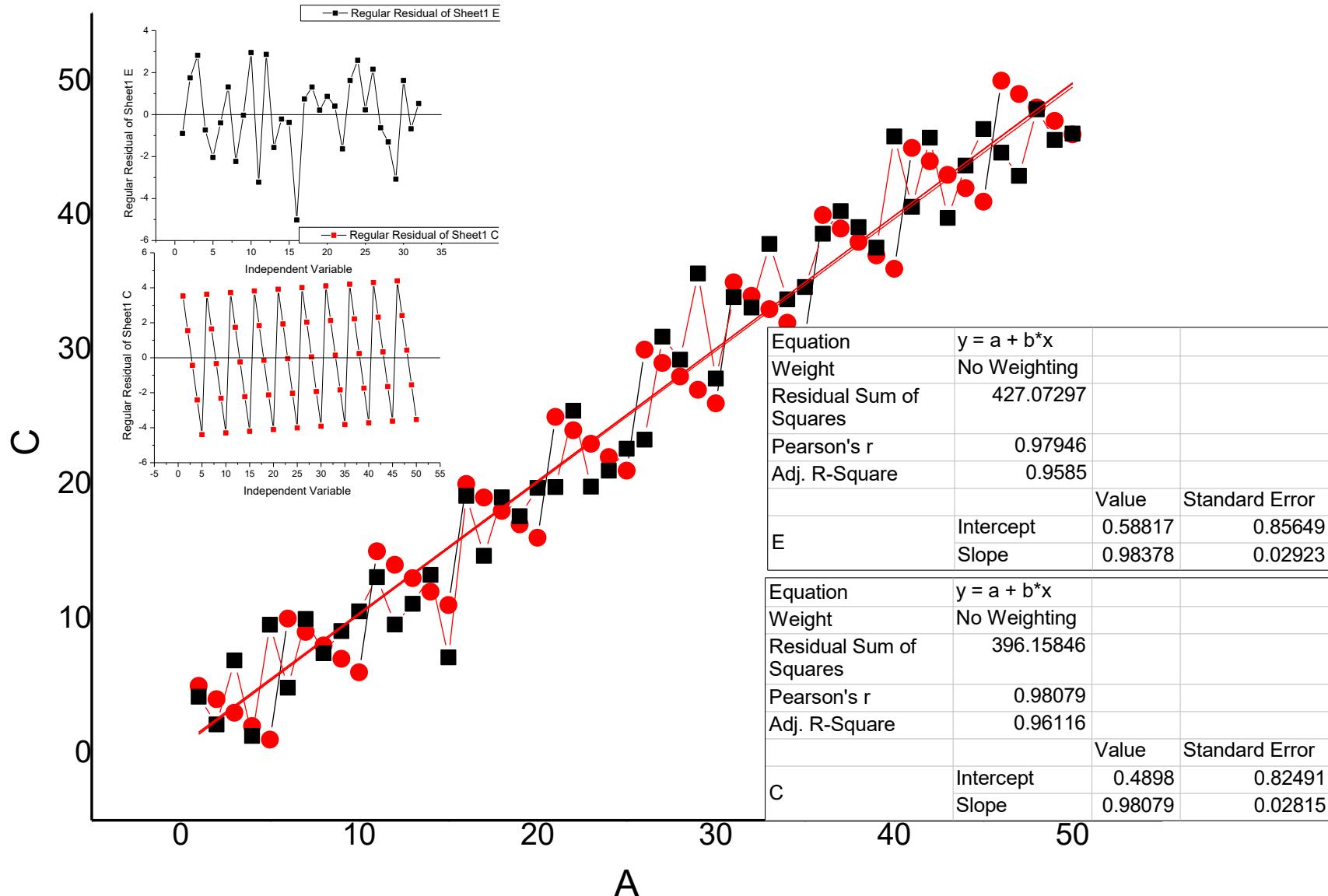


- Inspección visual
  - Análisis de la curva de residuos
- $$R_i = y_i - f(x_i).$$



**Fig. 5.9** The least-squares best-fit straight line to a sinusoidal variation. Error bars smaller than symbol size. **Health warning** It is possible to use the method of least squares to find the ‘best-fit’ straight line for *any* data set. This *does not* mean that a linear fit is an appropriate theoretical model.



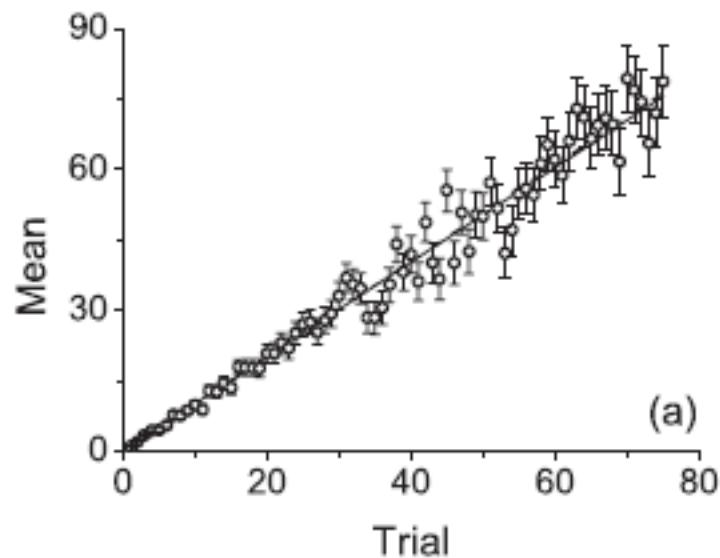


Los dos ajustes tienen similares pendiente, ordenada, incertezas, suma de residuos,  $R^2$ , pero...

MORALEJA: NO reducir el análisis de un ajuste a un único parámetro.

# Errores no uniformes: Ajuste con cuadrados mínimos ponderados

Es usual (por ej. en los instrumentos digitales por el cambio de escala o linealizar datos) que los  $\sigma_{yi}$  sean distintos  $\Rightarrow$  se pondera cada dato con la incertezza correspondiente  $\sigma_{yi}$ ,  
 $y = a_1 + a_2x$



# Ajuste con una recta, cuadrados mínimos ponderados

Es usual (por ej. en los instrumentos digitales por el cambio de escala o linealizar datos) que los  $\sigma_{y_i}$  sean distintos  $\Rightarrow$  se pondera cada dato con la incerteza correspondiente  $\sigma_{y_i}$ ,

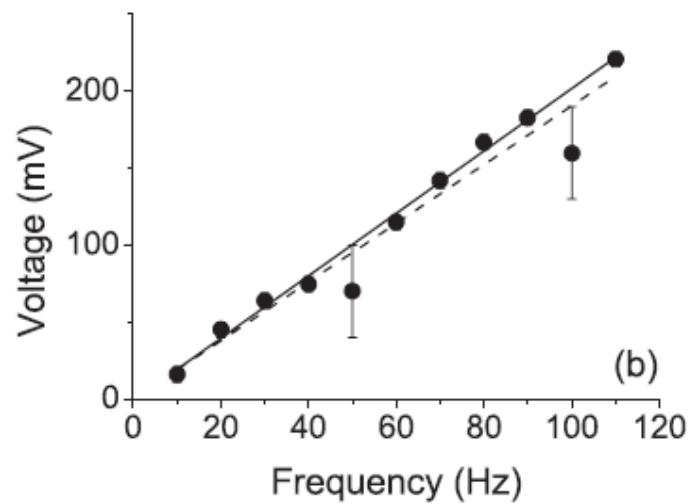
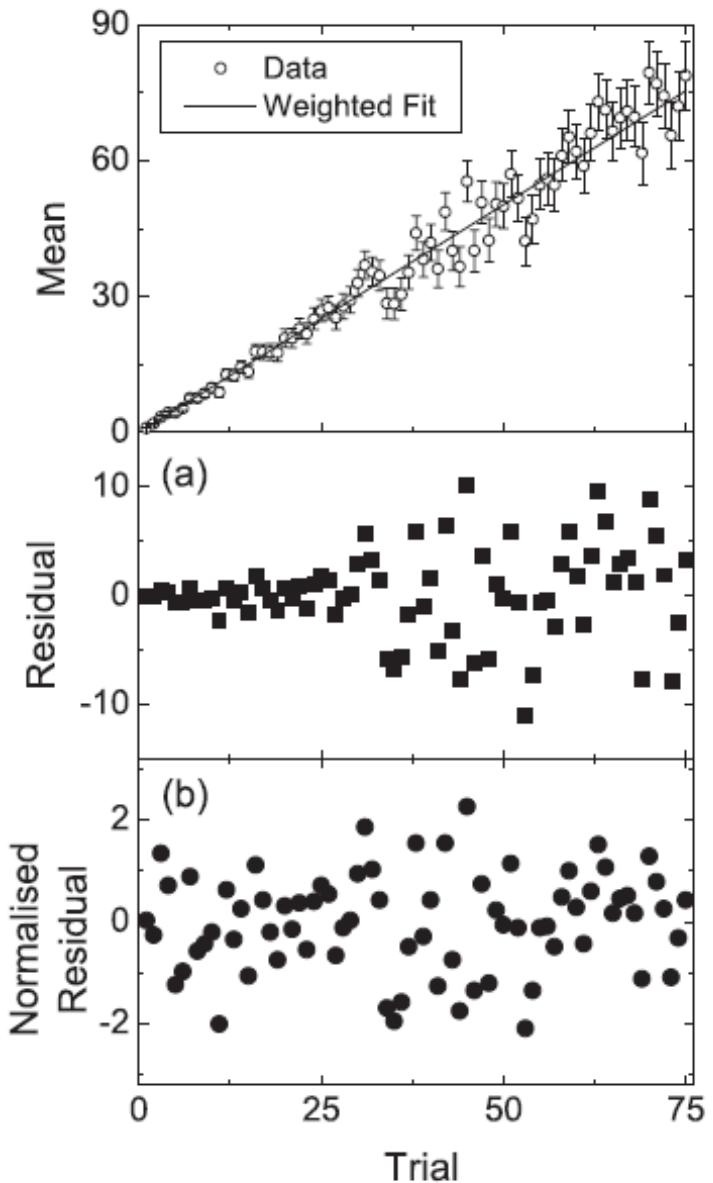
$$y = a_1 + a_2x$$

$$a_1 = \Gamma^{-1} \left( \sum_{i=1}^N y_i / \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 / \sigma_{y_i}^2 - \sum_{i=1}^N x_i y_i / \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^N x_i / \sigma_{y_i}^2 \right) \quad s_{a_1}^2 = \Gamma^{-1} \left( \sum_{i=1}^N x_i^2 / \sigma_{y_i}^2 \right)$$

$$a_2 = \Gamma^{-1} \left( \sum_{i=1}^N 1 / \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^N x_i y_i / \sigma_{y_i}^2 - \sum_{i=1}^N x_i / \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^N y_i / \sigma_{y_i}^2 \right) \quad s_{a_2}^2 = \Gamma^{-1} \left( \sum_{i=1}^N 1 / \sigma_{y_i}^2 \right)$$

$$\Gamma = \sum_{i=1}^N 1 / \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 / \sigma_{y_i}^2 - \left( \sum_{i=1}^N x_i / \sigma_{y_i}^2 \right)^2$$

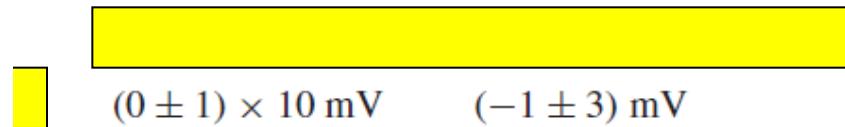
Los residuos NORMALIZADOS se calculan como:  $R_i = \frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_{y_i}}$



Graph (b)

Unweighted

Weighted



El histograma de la curva de residuos normalizada debería dar una distribución gaussiana

$$R_i = \frac{y_i - y(x_i)}{\alpha_i}$$

# DATOS CORRELACIONADOS

- Volviendo a la estimación de incertezas, ¿Qué sucede si las dos variables  $x$  e  $y$  no son independientes? Sea:

$$z = f(x, y), \quad z_i = f(x_i, y_i) \approx f(\bar{x}, \bar{y}) + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\bar{x}, \bar{y}} (x_i - \bar{x}) + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\bar{x}, \bar{y}} (y_i - \bar{y})$$

$$s_z^2 \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{\bar{x}, \bar{y}} (x_i - \bar{x}) + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_{\bar{x}, \bar{y}} (y_i - \bar{y}) \right]^2$$

$$= \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 \Bigg|_{\bar{x}, \bar{y}} s_x^2 + \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \Bigg|_{\bar{x}, \bar{y}} s_y^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial x} \Bigg|_{\bar{x}, \bar{y}} \frac{\partial f}{\partial y} \Bigg|_{\bar{x}, \bar{y}} s_{xy}$$

$$s_{xy} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N [(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})]$$

$s_{xy}$  es la COVARIANZA y mide la correlación entre las fluctuaciones alrededor de los valores medios de  $x$  e  $y$ . Si  $x$  e  $y$  son independientes entonces  $s_{xy} = 0$ .

# DATOS CORRELACIONADOS

## IMPORTANTE:

Si  $x$  e  $y$  NO fueron medidos simultáneamente, entonces  $s_{xy} = 0$

-Por ejemplo si mido la longitud de un péndulo 10 veces con una regla y luego su período 50 veces con un cronómetro, puedo asegurar que  $s_{LT} = 0$

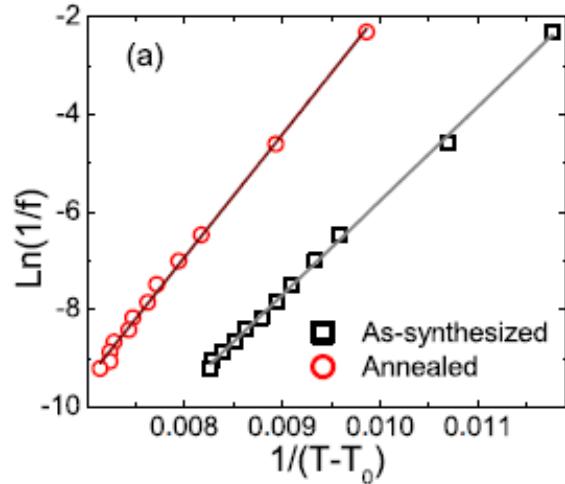
-En el caso de la medición de  $R$ , si el tiempo de medición es mayor que el tiempo característico de la fuente de corriente (típicamente 50 Hz), se pierde la correlación y  $s_{IV} = 0$ .

## Ajuste por cuadrados mínimos con funciones no lineales en los parámetros

Si los datos NO son lineales en los parámetros:

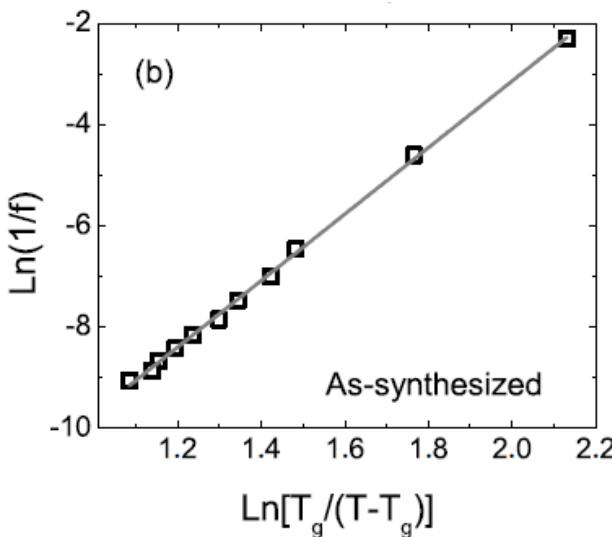
### 1. Ver si hay forma de linealizar. Por ej.

$$y = \frac{A}{1+Bx} \rightarrow \frac{1}{y} = \frac{1}{A} + \frac{B}{A}x$$



$$\frac{1}{f} = \tau = \tau_o \exp\left(-\frac{E/k_B}{T-T_0}\right) \quad E, \tau_0 ?$$

$$\ln \frac{1}{f} = \frac{E/k_B}{T-T_0} + \ln \tau_o$$



$$\frac{1}{f} = \tau = \tau_o \left(\frac{T_g}{T-T_g}\right)^\alpha \quad \alpha, \tau_0 ?$$

$$\ln \frac{1}{f} = \alpha \ln \left(\frac{T_g}{T-T_g}\right) + \ln \tau_o$$

## Ajuste por cuadrados mínimos con funciones no lineales en los parámetros

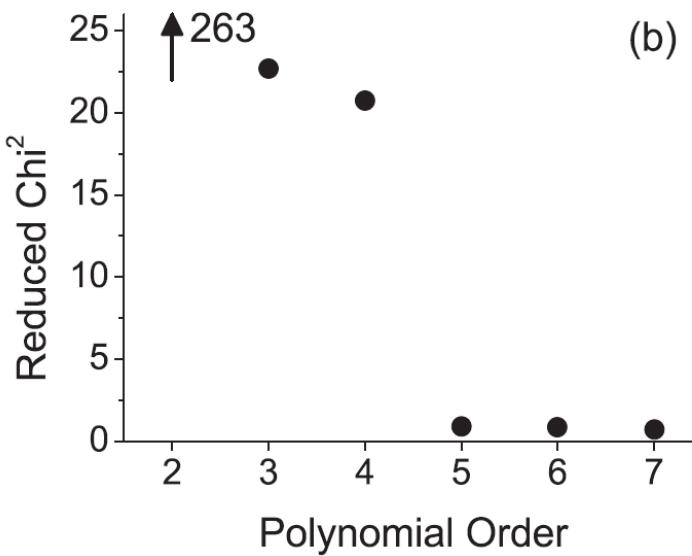
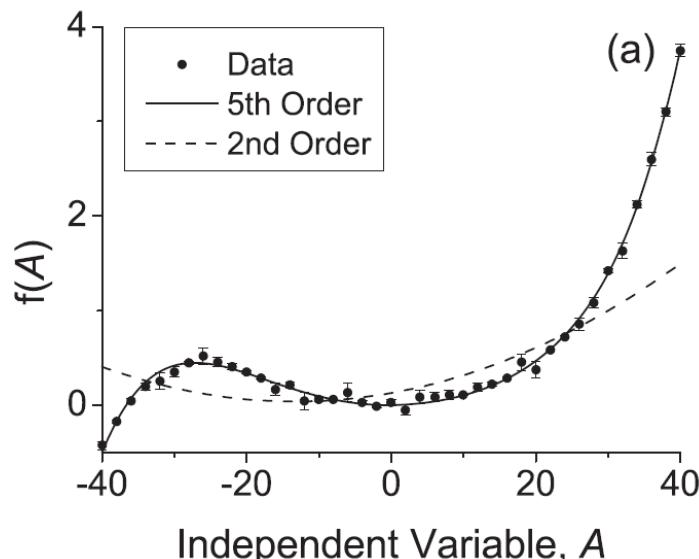
Si los datos NO son lineales o no se puen los parámetros:

1. Ver si hay forma de linealizar.

**2. Proponer un modelo que describa “adecuadamente” los datos:**  $y(x) = f(x, a_1, a_2, \dots, a_N)$

Considerar que si dos modelos funcionan, conviene tomar el que usa menos parámetros (Navaja de Occam, Fraile franciscano siglo XIV).

Evitar la sobreparametrización del modelo de ajuste de datos



*For every complex problem there is an answer that is clear, simple, neat, plausible, and ... WRONG.*

Henry-Louis Mencken

## Ajuste por cuadrados mínimos con funciones no lineales en los parámetros

Si los datos NO son lineales o no se puen los parámetros:

1. Ver si hay forma de linealizar.
2. Proponer un modelo que describa “adecuadamente” los datos:

$$y(x) = f(x, a_1, a_2, \dots, a_N)$$

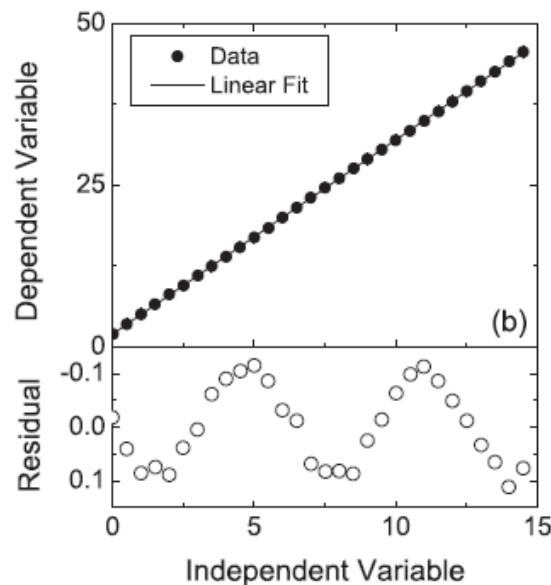
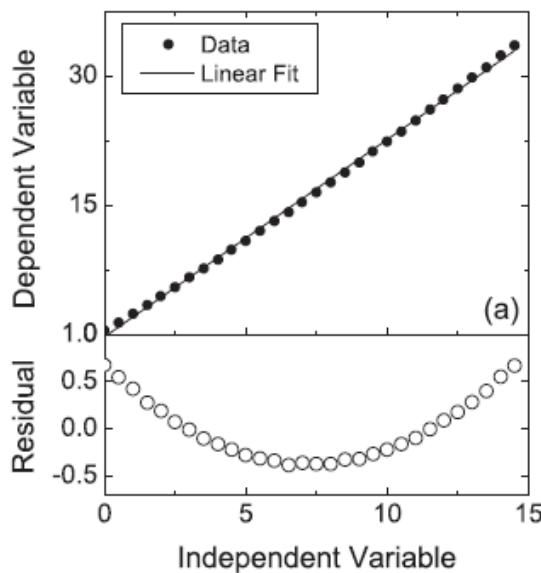
Considerar que si dos modelos funcionan, conviene tomar el que usa menos parámetros (Navaja de Occam).

3. Variar  $a_1, a_2, \dots, a_N$  hasta obtener un mínimo en  $\chi^2$ . (Ya veremos como...)

4. Dado un conjunto  $(a_1, a_2, \dots, a_N)$  calcular los residuos normalizados para cada  $x_i, y_i$

$$R_i^2 = \left[ \frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_{y_i}} \right]^2, \quad \chi^2 = \sum R_i^2$$

## Ajuste por cuadrados mínimos con funciones no lineales en los parámetros



**4. Dado un conjunto  $(a_1, a_2, \dots, a_N)$  calcular los residuos normalizados para cada  $x_i, y_i$**

$$R_i^2 = \left[ \frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_{y_i}} \right]^2, \quad \chi^2 = \sum R_i^2$$

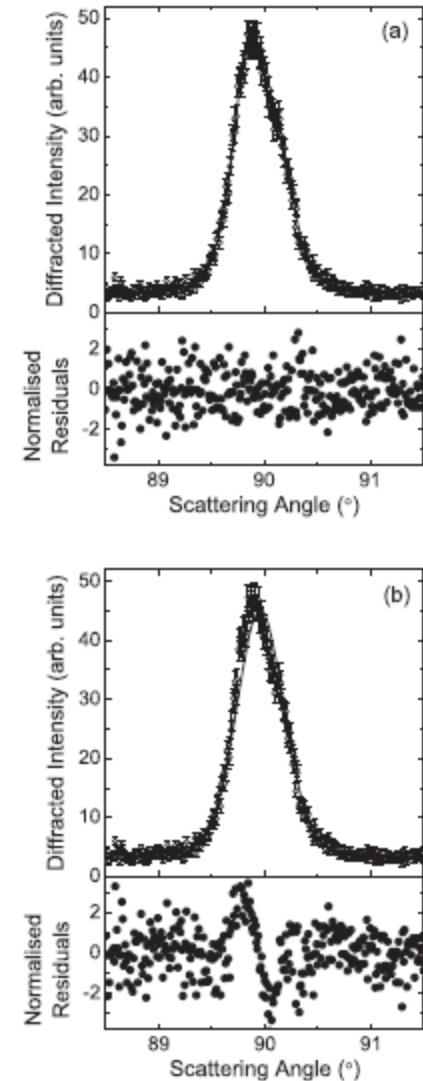


Fig. 6.13 Experimental spectra and weighted least-squares-fit (thick line) for the Cu (3 1 1) X-ray diffraction peak. In (a) the fit and residuals are shown for a constrained double peak model and in (b) the experimental data are fitted to a

## Ajuste por cuadrados mínimos con funciones no lineales en los parámetros

Si los datos NO son lineales o no se puen los parámetros:

1. Ver si hay forma de **linealizar**.

2. Proponer un modelo que describa “adecuadamente” los datos:

$$y(x) = f(x, a_1, a_2, \dots, a_N)$$

Considerar que si dos modelos funcionan, conviene tomar el que usa menos parámetros (Navaja de Occam).

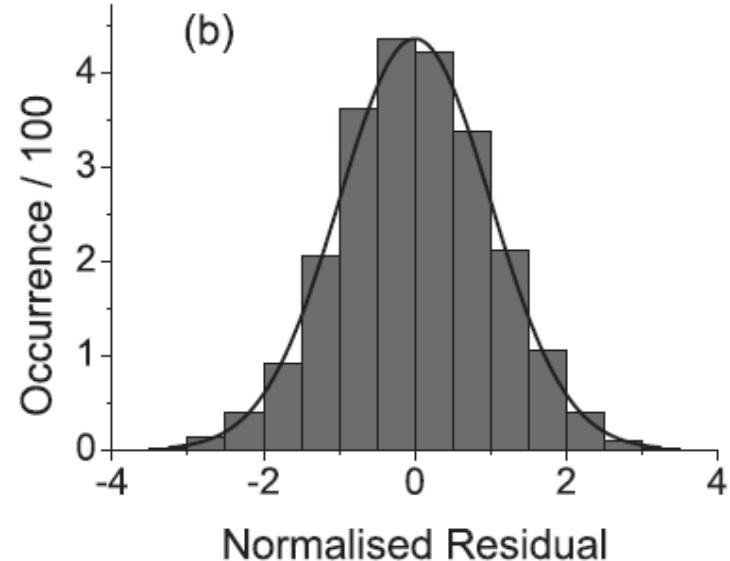
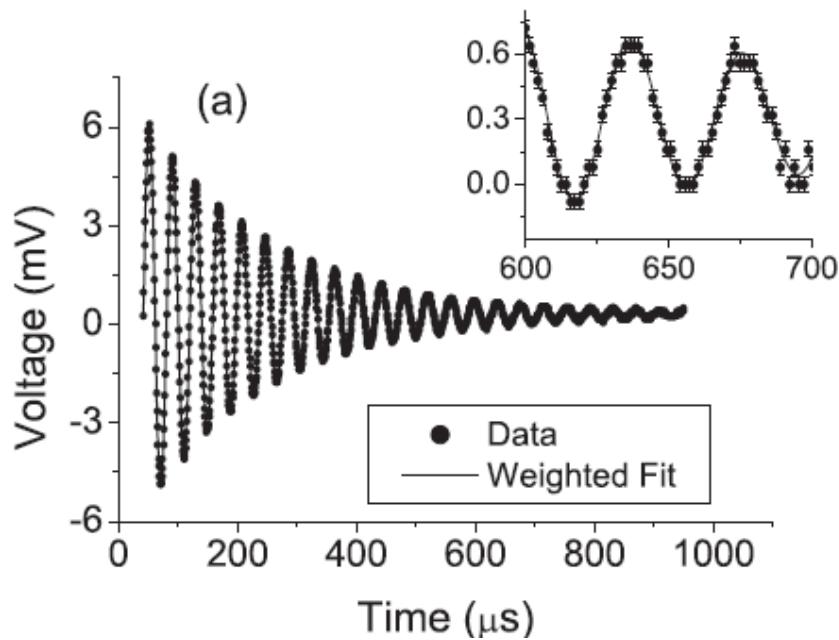
3. Modificar  $a_1, a_2, \dots, a_N$  hasta obtener un mínimo en  $\chi^2$ . (Ya veremos como)

4. Dado un conjunto  $(a_1, a_2, \dots, a_N)$  calcular los residuos normalizados para cada  $x_i, y_i$

$$R_i^2 = \left[ \frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_{y_i}} \right]^2, \quad \chi^2 = \sum R_i^2$$

5. Independientemente de que método usemos es FUNDAMENTAL partir de valores iniciales de  $a_1, a_2, \dots, a_N$  cercanos a los óptimos.

## Ejemplo: Circuito RLC



$$V(t) = V_{\text{bgd}} + V_0 \cos\left(2\pi \frac{t}{T} + \phi\right) \exp(-t/\tau)$$

¿Qué valores estimativos para los parámetros iniciales utilizaríamos?

Un primer criterio para ver si el modelo es adecuado:

- Aprox. 2/3 de los datos con su error deben solapar la función de ajuste
- Los Residuos **Normalizados** deben tener distribución Gaussiana

# Métodos numéricos para encontrar el mínimo de $\chi^2$

Todas las técnicas son **iterativas** y proponen algún algoritmo que va convergiendo al conjunto  $a_1, a_2, \dots, a_N$  que minimiza  $\chi^2$ .

## 1) Método de Newton-Raphson (1D)

Resuelve la ecuación  $f(x)=0$ .

Se parte de un valor cercano  $f(x_1)$

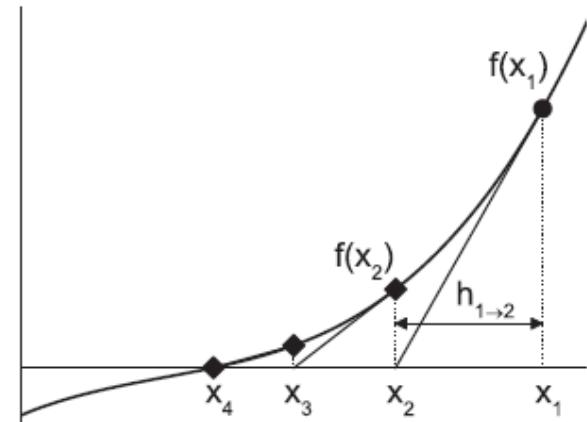
Si  $f(x_1+h)=0 \sim f(x_1)+f'(x_1).h \Rightarrow h= -f(x_1)/f'(x_1)$

Defino  $x_2=x_1+h = x_1-f(x_1)/f'(x_1)$  y  $h= -f(x_2)/f'(x_2)$

$$x_{n+1}=x_n+h = x_n-f(x_n)/f'(x_n)$$

y sigo hasta que  $f(x_n) < \varepsilon$

-Converge rápido si  $x_1$  está cercano a la solución

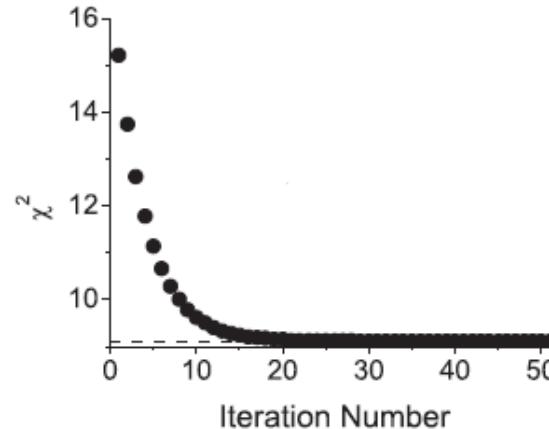
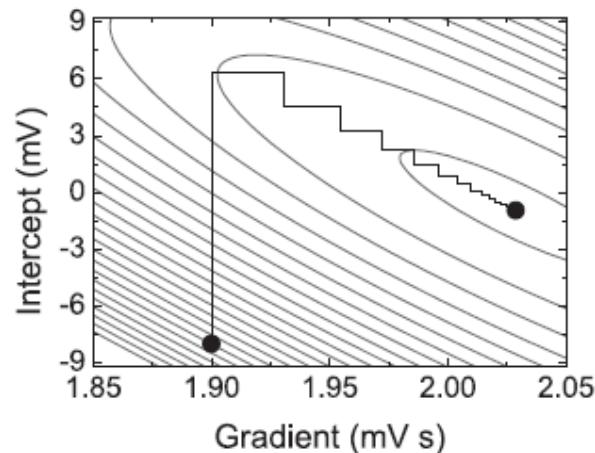


# Métodos numéricos para encontrar el mínimo de $\chi^2$

Todas las técnicas son **iterativas** y proponen algún algoritmo que va convergiendo al conjunto  $a_1, a_2, \dots, a_N$  que minimiza  $\chi^2$ .

## 2) Grid Search

- Para dos o más variables. Voy modificando de a una y calculo  $\chi^2$  hasta encontrar un mínimo y paso a la siguiente.
- Se repite el procedimiento hasta que se alcanza la tolerancia de convergencia. Por ejemplo cuando el valor de  $\chi^2$  cambia en menos de,  $10^{-3}$ .
- Es simple y depende poco de los parámetros iniciales
- Converge MUY lentamente si hay correlaciones.



### 3) Método de máximo gradiente

Variar los parámetros en forma secuencial no es muy eficiente, una mejora es acercarse vectorialmente al mínimo

Se define la componente  $i$  del vector gradiente de  $\chi^2$  como

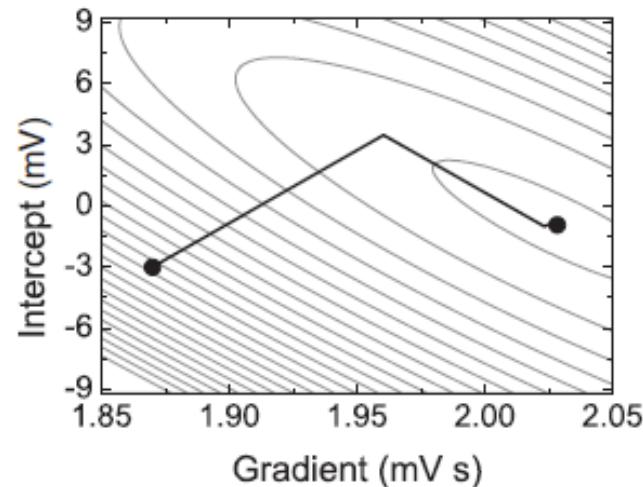
$$(\nabla \chi^2)_i = \frac{\partial \chi^2}{\partial a_i} \approx \frac{\chi^2(a_i + \delta a_i) - \chi^2(a_i)}{\delta a_i}$$

Si  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_N)$  uso como regla recursiva

$$\mathbf{a}_{s+1} = \mathbf{a}_s - \beta \nabla \chi^2(\mathbf{a}_s)$$

$\beta$  es un factor de escala “convenientemente” elegido

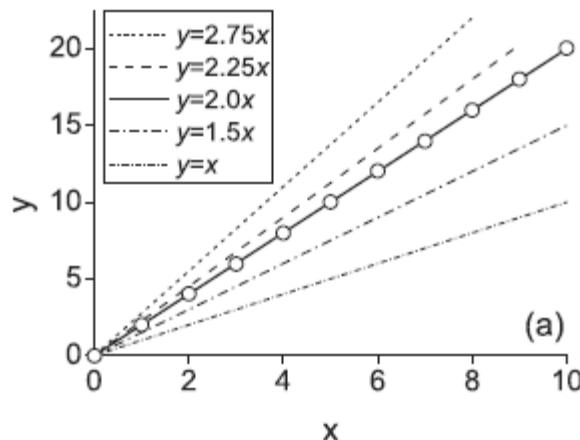
- + Inicialmente converge muy rápido
- Cuando me acerco al  $\chi^2$  mínimo la convergencia es más lenta ( $\nabla \chi^2 \sim 0$ )
- La determinación de  $\nabla \chi^2$  tiene mucho error porque resta dos números muy parecidos



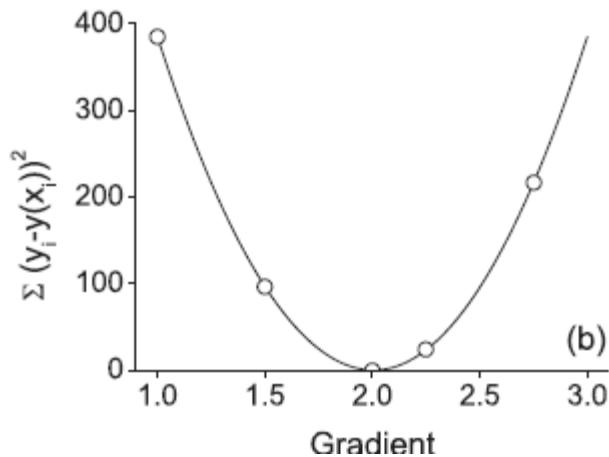
#### 4) Método de Newton-Raphson de segundo orden

En un entorno del min  $\chi^2$  la superficie es parabólica y puede aprox. por:

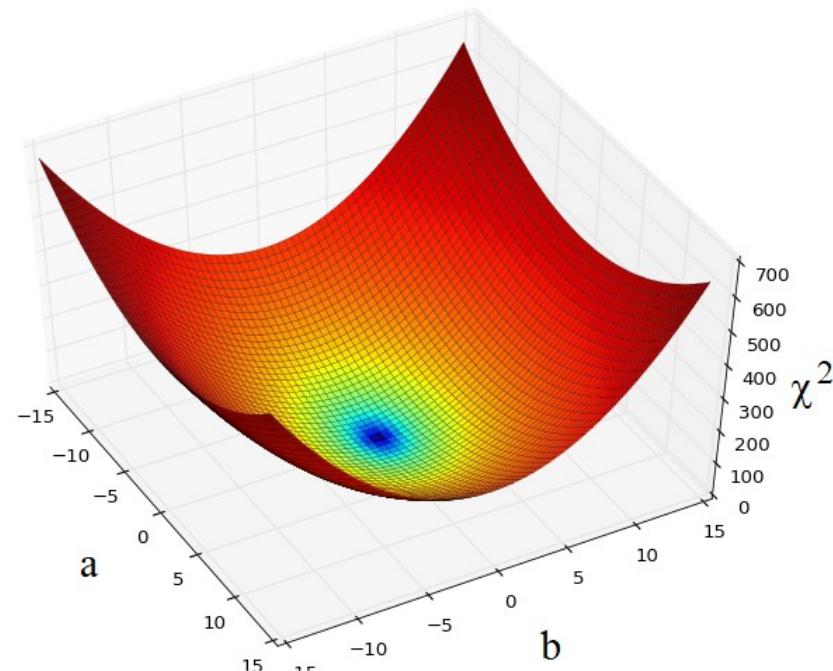
$$\chi^2(a_s + h) \approx \chi^2(a_s) + \sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} \right|_{a_s} \Delta a_j + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_j^2} \right|_{a_s} (\Delta a_j)^2$$



(a)



(b)



## 4) Método de Newton-Raphson de segundo orden

En un entorno del min  $\chi^2$  la superficie es parabólica y puede aprox. por:

$$\chi^2(a_s + h) \approx \chi^2(a_s) + \sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} \right|_{a_s} \Delta a_j + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left. \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_j^2} \right|_{a_s} (\Delta a_j)^2$$

$$\chi^2(a_s + h) \approx \chi^2(a_s) + g_s^t h + \frac{1}{2} h^t H_s h$$

$$g_s = \nabla \chi^2(a_s) = \left[ \frac{\partial \chi^2}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial \chi^2}{\partial a_N} \right]_{a_s} \quad H_s(a_s) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_1 \partial a_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_N \partial a_1} & \dots & \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_N^2} \end{bmatrix}$$

$$\nabla \chi^2(a_s + h) = g_s + H_s h = 0 \Rightarrow h = -H_s^{-1} g_s$$

Regla de iteración  $a_{s+1} = a_s + h = a_s - H_s^{-1} g_s$

- Funciona bien solo cuando los parámetros iniciales son cercanos al valor que minimiza  $\chi^2$ .
- Requiere calcular derivadas primeras y segundas e invertir matrices.

## 5) Método de Levenberg-Marquardt

Combina 3) (máximo gradiente )y 4) (Newton-Raphson). Usando 3) para aproximarse rápidamente a la solución en forma vectorial y 4) para obtener valores más refinados. Notar que las reglas de iteración son similares

$$3) \quad \mathbf{a}_{s+1} = \mathbf{a}_s - \beta \mathbf{g}_s$$

$$\mathbf{g}_s = \nabla \chi^2(\mathbf{a}_s) = \left[ \frac{\partial \chi^2}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial \chi^2}{\partial a_N} \right]_{\mathbf{a}_s}$$

$$4) \quad \mathbf{a}_{s+1} = \mathbf{a}_s - \mathbf{H}_s^{-1} \mathbf{g}_s$$

$$\mathbf{H}_s(\mathbf{a}_s) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_1^2} & \dots & \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_1 \partial a_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_N \partial a_1} & \dots & \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_N^2} \end{bmatrix}$$

L-M propusieron:

$$\mathbf{a}_{s+1} = \mathbf{a}_s - (\bar{\mathbf{H}}_s)^{-1} \mathbf{g}_s, \quad (\bar{\mathbf{H}}_s)_{ii} = (1 + \lambda)(\mathbf{H}_s)_{ii}, \quad (\bar{\mathbf{H}}_s)_{jk} = (\mathbf{H}_s)_{jk}$$

- $\lambda \ll 1$  4) Newton-Raphson
- $\lambda \gg 1$  3) Máximo gradiente

Utiliza el parámetro  $\lambda$  para variar el ángulo de la trayectoria. Lejos del mínimo, la trayectoria sigue el camino de descenso más pronunciado y cambia suavemente a medida que se acerca al mínimo y la aproximación parabólica es válida.

## 5) Método de Levenberg-Marquardt

- 1) Elegir un valor inicial para  $\mathbf{a}$ , evaluar  $\chi^2$ , iniciar  $\lambda \sim 10^{-3}$
- 2) Calcular  $\mathbf{h}$  en base a  $\bar{\mathbf{H}}$  y evaluar  $\chi^2$  en  $\mathbf{a} + \mathbf{h}$
- 3) Si  $\chi^2$  aumentó, incrementar  $\lambda$  (típico x10) y volver a 2
- 4) Si  $\chi^2$  disminuyó, decrementar  $\lambda$  (típico x10), actualizar  $\mathbf{a} = \mathbf{a} + \mathbf{h}$ , y volver a 2

En algún lugar poner condición de convergencia para parar (típico en 2)

Este método combina eficientemente 3) y 4) y es el que utilizan la mayoría de los programas de ajuste de datos.

Resumen de las fórmulas utilizadas para actualizar la siguiente iteración ( $a_{s+1} = a_s + h$ ) para diversos métodos de ajuste.  $g$  es el vector gradiente,  $H$  es la matriz de Hesse y  $J$  es la matriz jacobiana.

---

Gradient descent	$h = -\beta g$
Newton	$H h = -g$
Gauss–Newton	$2J^T J h = -g$
Levenberg	$(H + \lambda \mathbb{1}) h = -g$
Marquardt–Levenberg	$(H + \lambda \text{diag}[H]) h = -g$

---

# Estimación de la incertezas en los parámetros de ajuste

Definimos la “Matriz de Curvatura”  $A = \frac{1}{2} H \Rightarrow A_{jk} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_j \partial a_k}$

Y la “Matriz de Covarianza”  $C = A^{-1}$

La incertezas en el parámetro  $a_i$  viene dada por  $\sigma_{a_i} = \sqrt{C_{ii}}$

Si  $C_{jk} = 0 \Rightarrow$  incertezas NO correlacionadas

Si  $C_{jk} \neq 0 \Rightarrow$  HAY correlación.

# Estimación de la incertezas: $y=mx+c$

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_i - y(x_i))^2}{\sigma_i^2};$$

Calculo

$$A_{jk} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_j \partial a_k}$$

$$A_{11} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial c^2} = \sum_i \frac{1}{\sigma_i^2};$$

$$A_{22} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial m^2} = \sum_i \frac{x_i^2}{\sigma_i^2};$$

$$A_{12} = A_{21} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial c \partial m} = \sum_i \frac{x_i}{\sigma_i^2}$$

$$C = A^{-1} = \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \begin{bmatrix} A_{22} & -A_{21} \\ -A_{12} & A_{11} \end{bmatrix} = \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} A_{22} & -A_{21} \\ -A_{12} & A_{11} \end{bmatrix}$$

$$\sigma_c^2 = \frac{\sum_i \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}}{\Delta}; \quad \sigma_m^2 = \frac{\sum_i \frac{1}{\sigma_i^2}}{\Delta};$$

$$Si \quad \sigma_i = \sigma_j = \sigma \quad \Rightarrow \quad \sigma_c^2 = \frac{\sigma^2 \sum_i x_i^2}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2}; \quad \sigma_m^2 = \frac{N \sigma^2}{N \sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2}$$

# ¿Cómo determinar si un modelo describe bien los datos experimentales?

- A partir del ajuste determiner  $f(x, a_1, a_2, \dots, a_N)$ ,  $\mathbf{a}$ ,  $\sigma_a$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - y(x_i))^2}{\sigma_{y_i}^2}$$

- Obtener un valor para  $\chi^2_{\min}$ .

$$\chi^2_N = \chi^2_{\min} / N_L$$

- Definimos  $\chi^2$  reducido o normalizado como:

- Definimos los grados de libertad como:

$$N_L = N - N_P \quad (\text{Nº datos} - \text{Nº parámetros})$$

- El ajuste es bueno cuando

$$\chi^2_N \approx 1.$$

# ¿Cómo determinar si un modelo describe bien los datos experimentales?

- El ajuste es bueno cuando  $\chi^2_N \approx 1$ .

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - y(x_i))^2}{\sigma_{y_i}^2}$$

$\chi^2 \approx N$ , como  $N_L = N - N_P \approx N \rightarrow \chi^2_N \approx 1$

- $\chi^2_N >> 1$  el ajuste no es bueno. Cuestionar el modelo si  $\chi^2_N > 1.5$  .
- $\chi^2_N << 1$  verificar si se sobreestimaron las barras de error, o los valores observados y esperados son irrealmente cercanos

# Selección de modelo adecuado a partir de la estadística o de criterios físicos

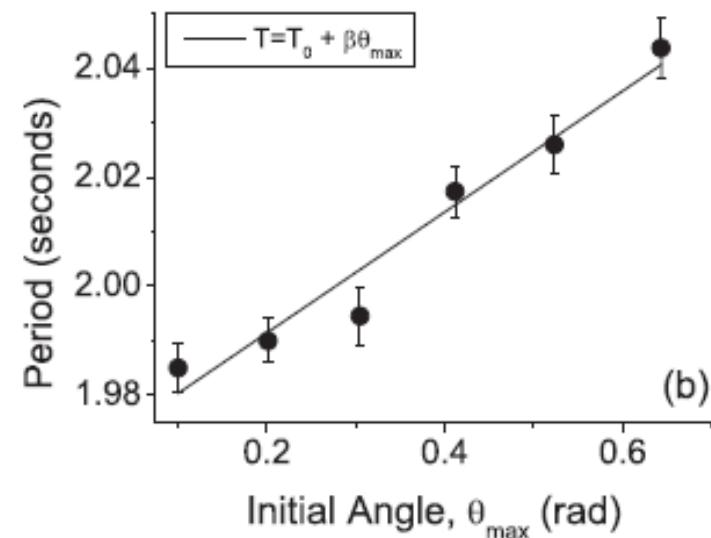
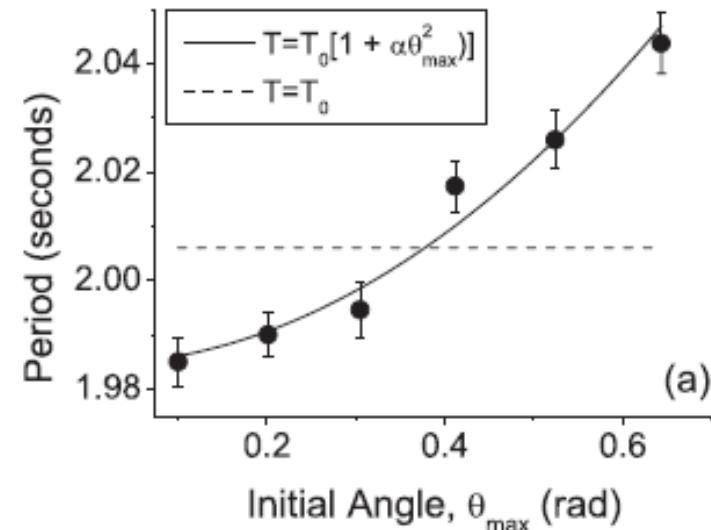
## Ejemplo del período del péndulo

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{L}{g}} \left[ 1 + \frac{1}{16} (\theta_{\max})^2 \right]$$

**Table 8.2** Three different models are used for the dependence of the period of oscillation of a pendulum on the initial angular displacement.

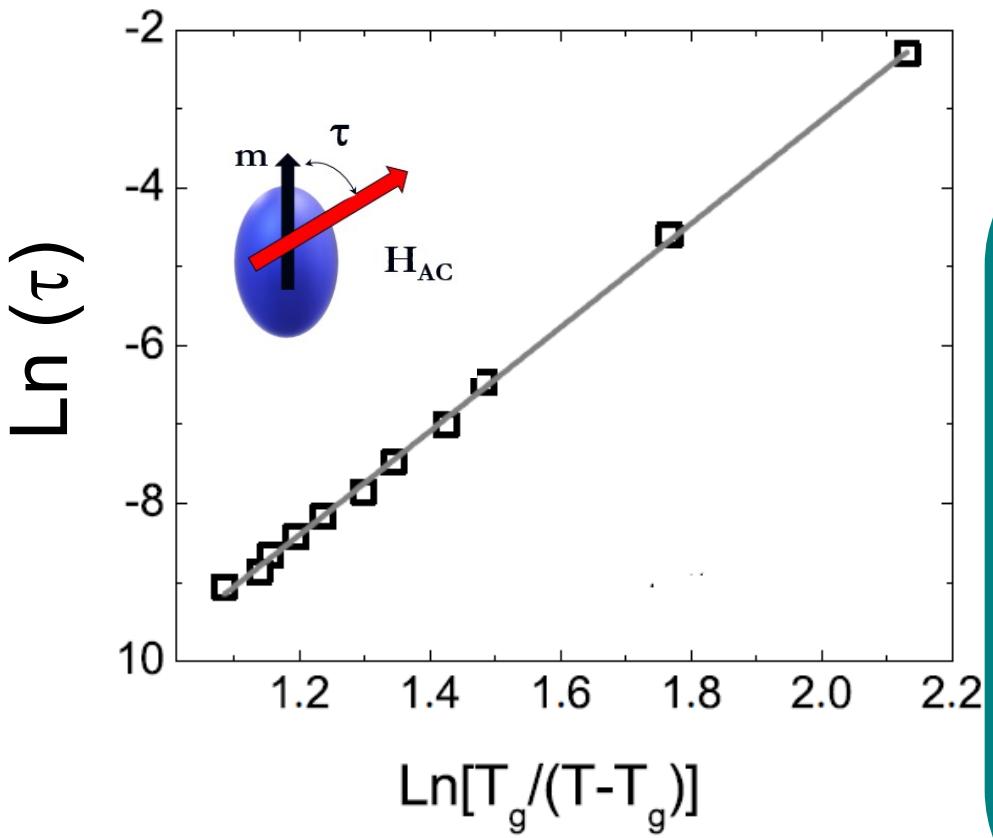
Model	Degrees of freedom	$\chi^2_{\min}$	$\chi^2_v$
$T = T_0$	5	107.2	21.4
$T = T_0 [1 + \alpha \theta_{\max}^2]$	4	3.39	0.9
$T = T_0 [1 + \beta \theta_{\max}]$	4	4.39	1.1

La estadística no me responde cuál modelo es más apropiado  
**¡Aplicar criterios físicos!**  
Por ejemplo paridad de la función



# Selección de modelo adecuado a partir de la estadística o de criterios físicos

Mecanismo de relajación  
momento magnético de  
Nanopartículas magnéticas



Ley de Arrehnius

$$\tau = \tau_0 \exp(E_a / k_B T)$$

$\tau_0 \sim 10^{-30}$   $\rightarrow$  No tiene sentido físico

Ley de Potencias

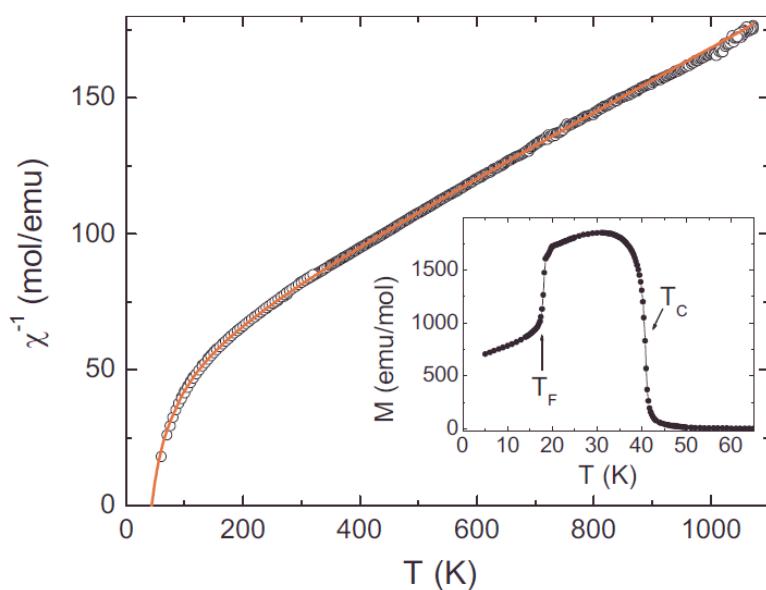
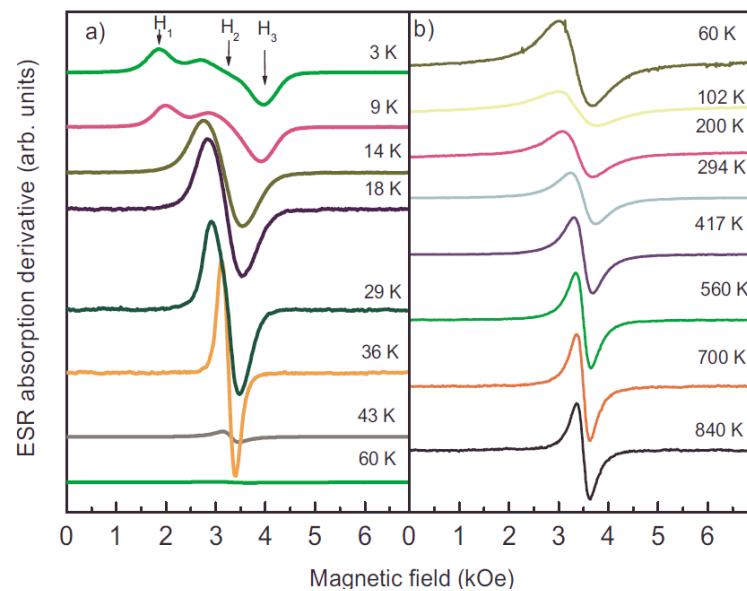
$$\tau = \tau_0 \left( \frac{T_g}{T - T_g} \right)^{z\nu}$$

Power law (low  $T$ )

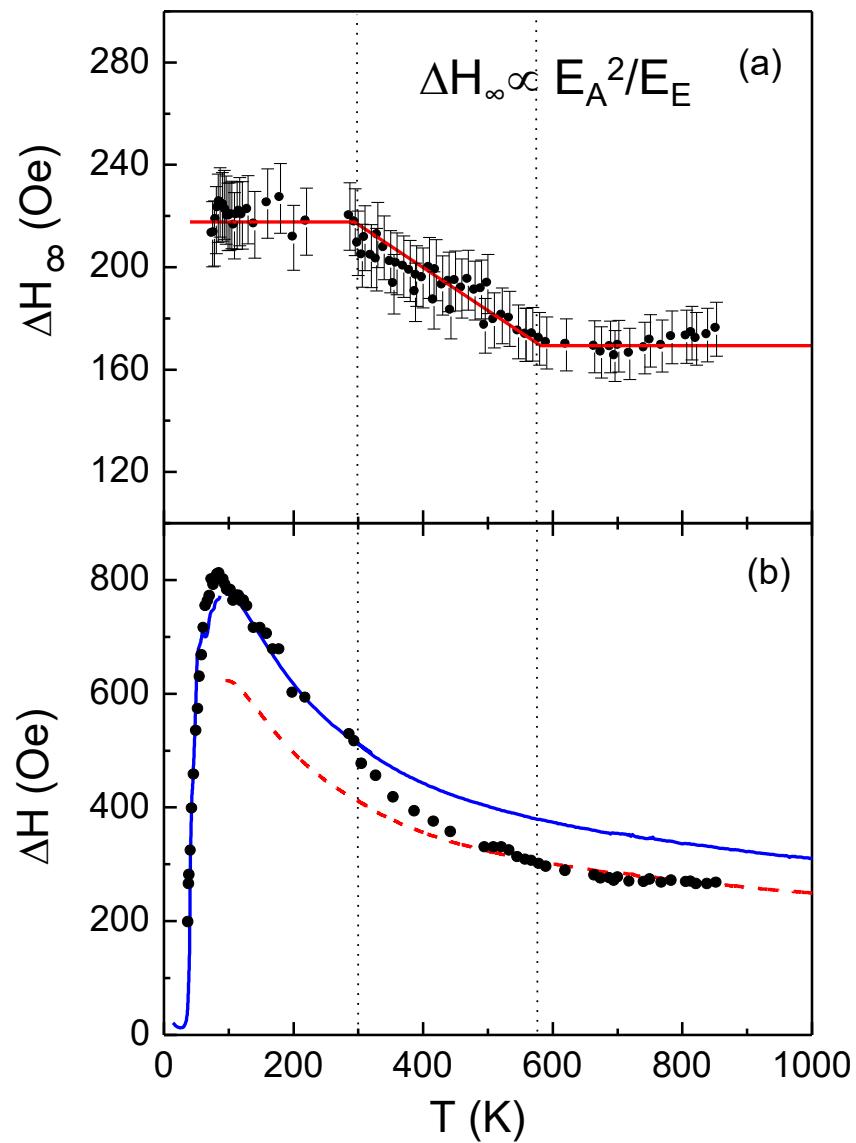
$\tau_0$ (s)	$T_g$ (K)	$z\nu$
$8.5 \times 10^{-8}$	3.0(1)	6.6(1)

Si confiamos en nuestros datos y el modelo sin embargo no hay acuerdo

## Estudio de Anisotropía Magnética MnCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

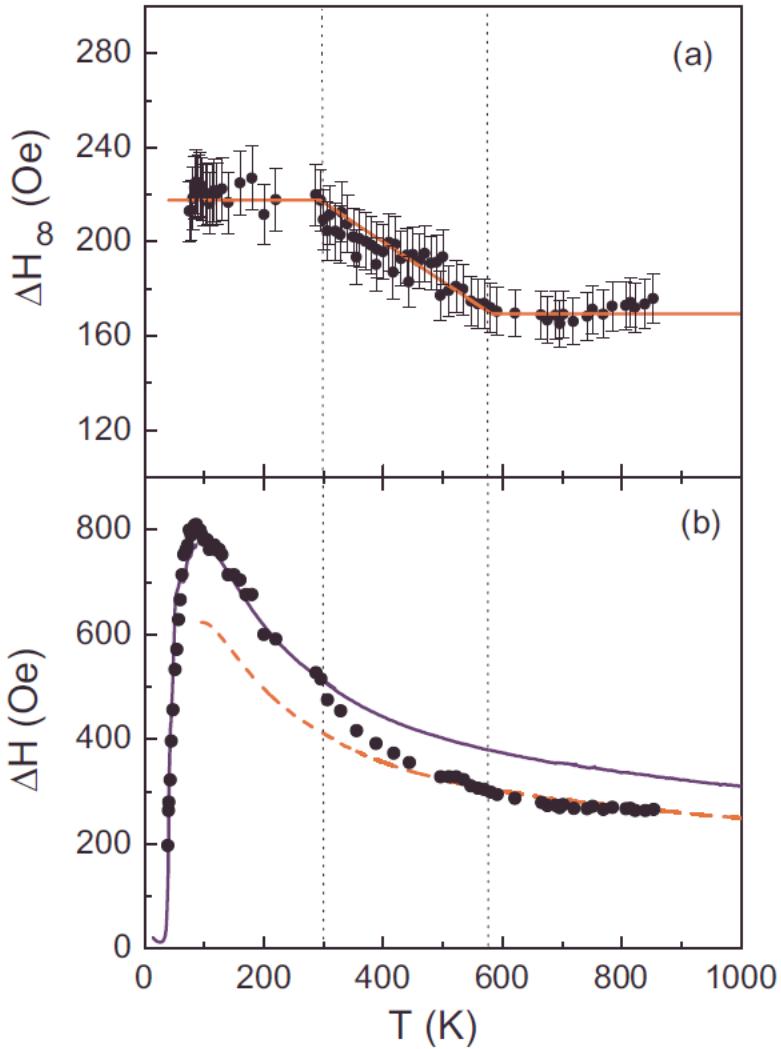


$$\Delta H(T) = [\chi_s(T)/\chi(T)]\Delta H_\infty$$

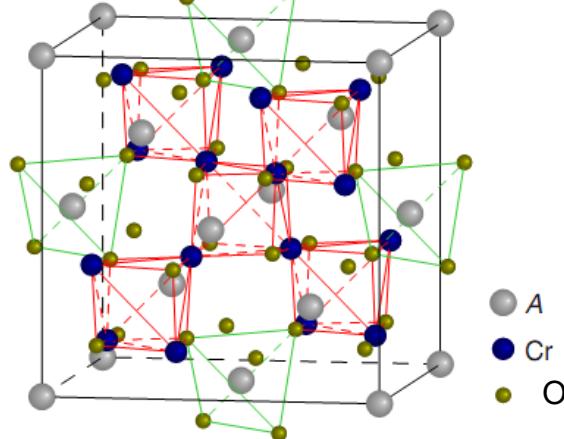
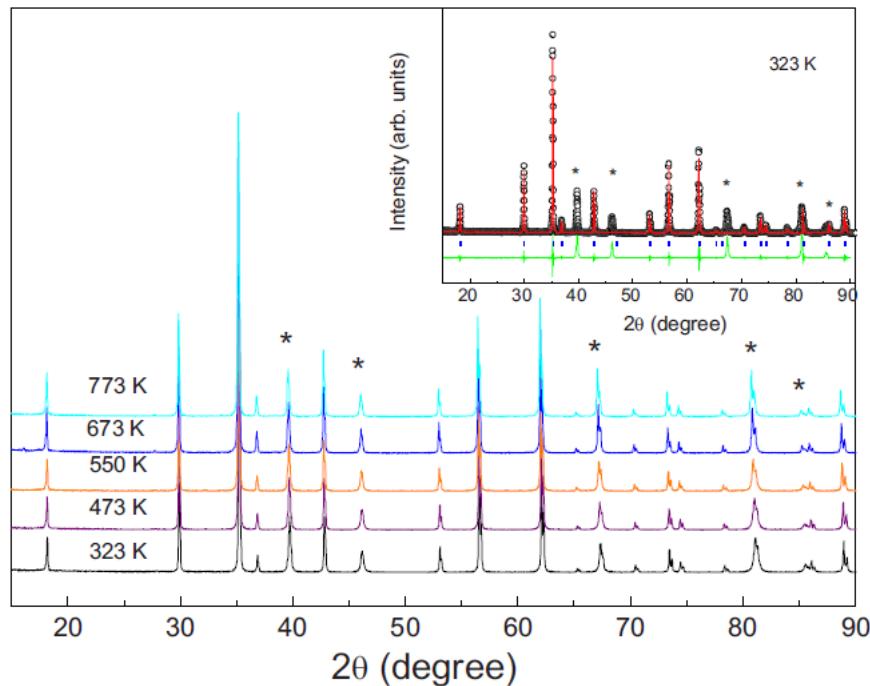


# Estudio de Anisotropía Magnética

$$\Delta H(T) = [\chi_s(T)/\chi(T)] \Delta H_\infty$$

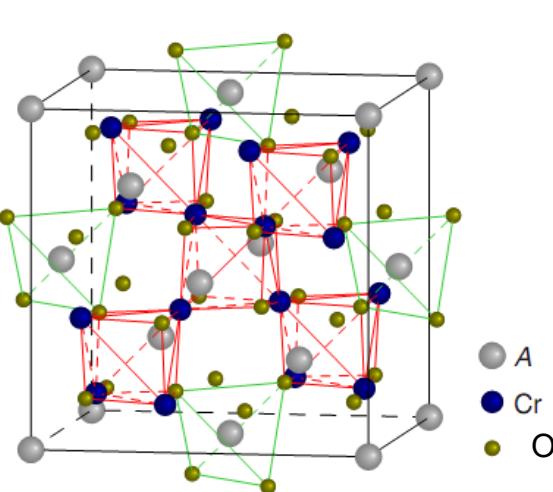
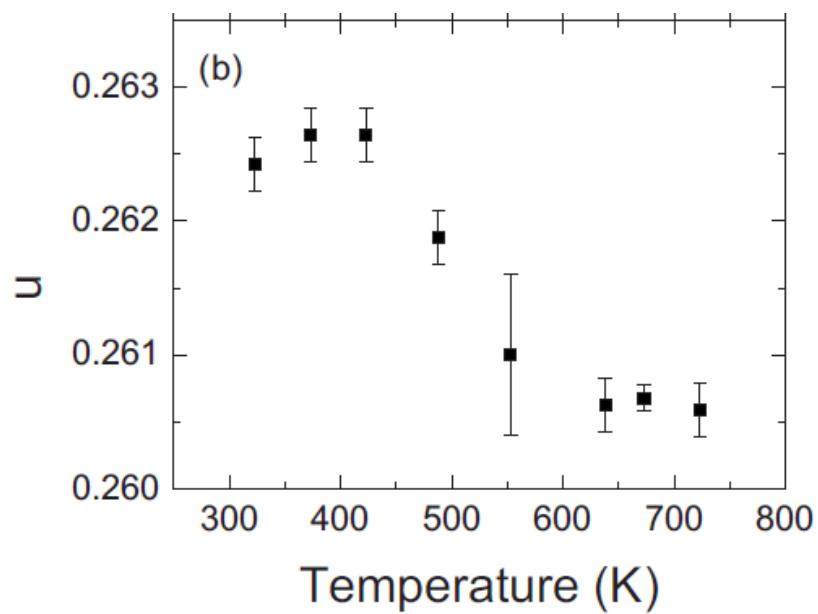
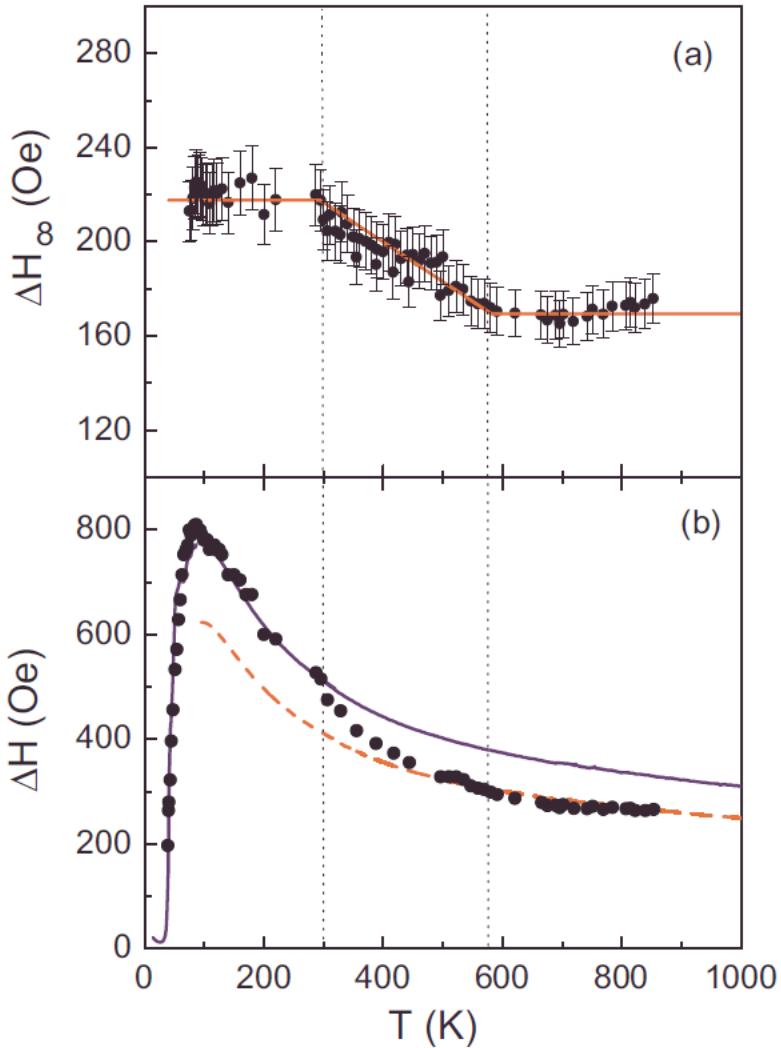


Intensity (arb. units)

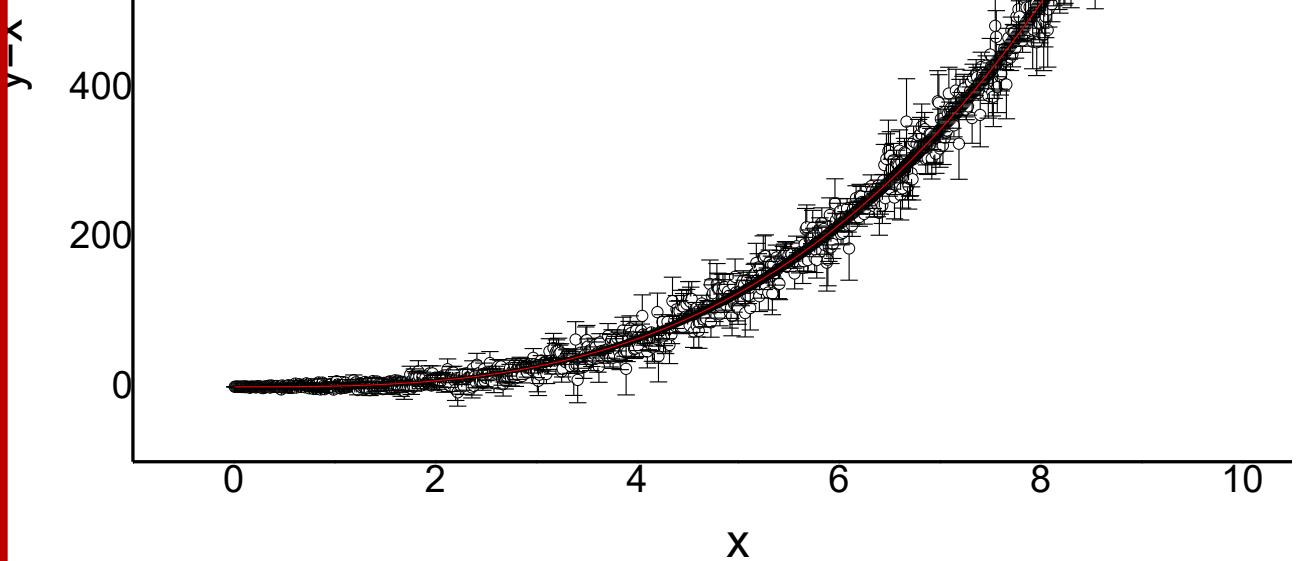


# Determinacion de distorsion estructural a partir del ajuste

$$\Delta H(T) = [\chi_s(T)/\chi(T)] \Delta H_\infty$$

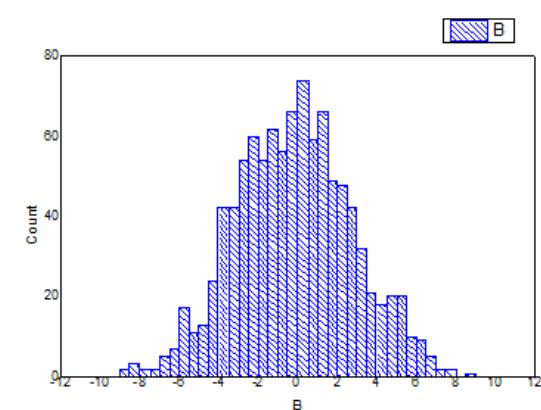
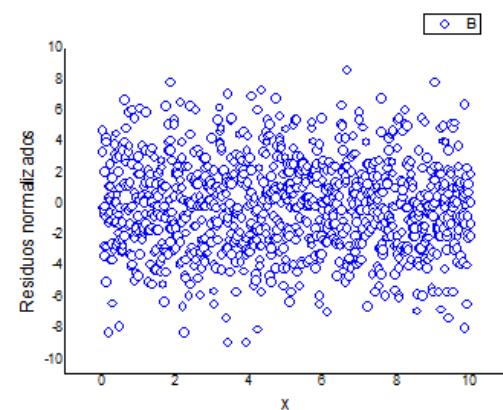
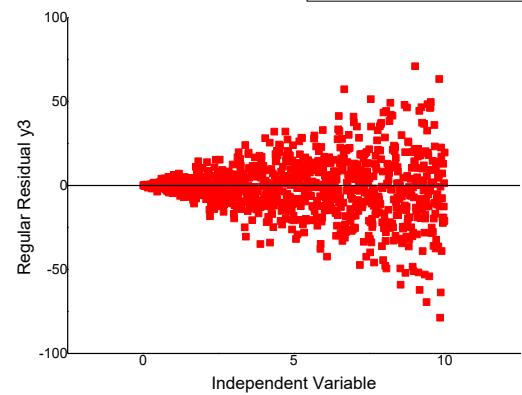


Model	Cubic	
Equation	$y = A + B*x + C*x^2 + D*x^3$	N=1000
Reduced Chi-Sqr	1.00044	
Adj. R-Square	1	
	Value	Standard Error
A	-0.00614	0.00723
B	-0.01057	0.02836
C	0.00413	0.01091
D	0.99971	9.01681E-4



○  $y3$   
— Cubic Fit  $y3$

■ Regular Residual  $y3$



# Otro ejemplo de la vida real

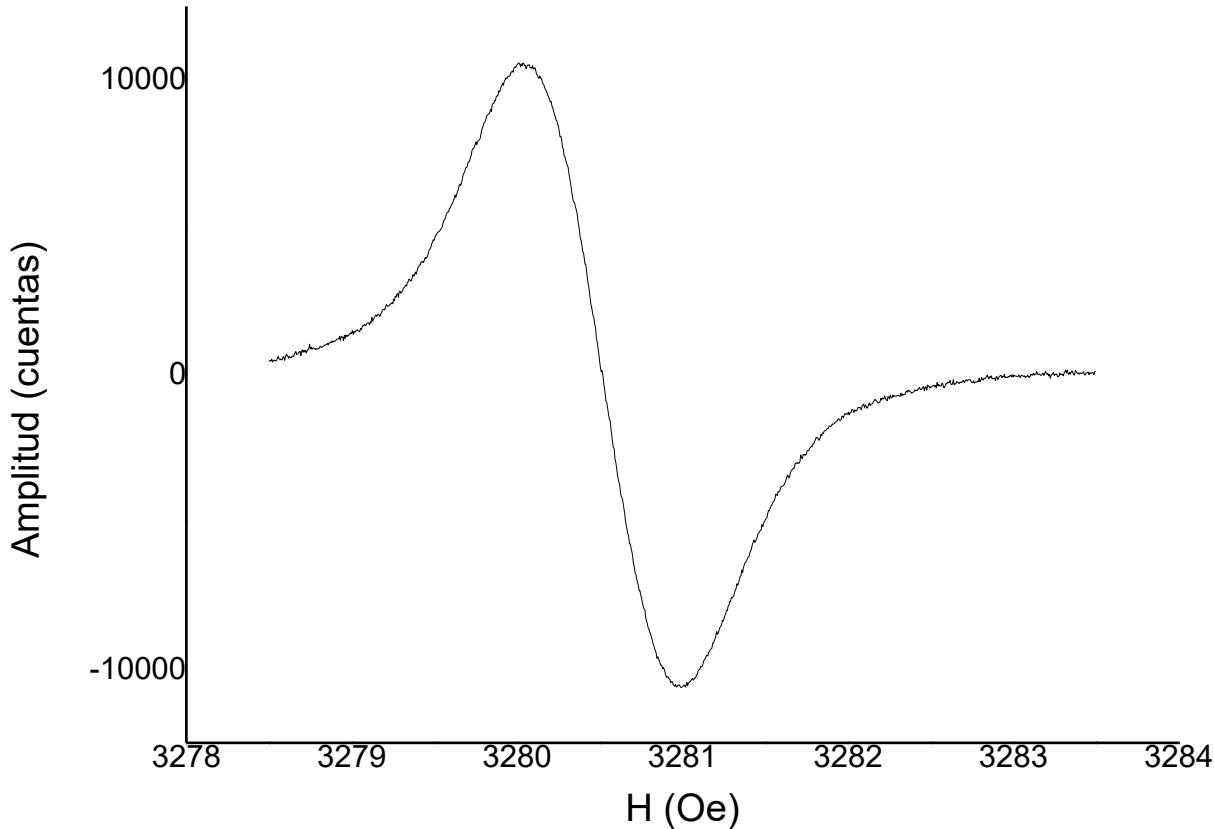
Ajuste de una señal en forma de “campana” (en este caso la derivada)

-Gaussiana?

$$f_G(x) = y_0 + Ae^{\frac{2(x-x_c)^2}{w^2}}$$

-Lorentziana?

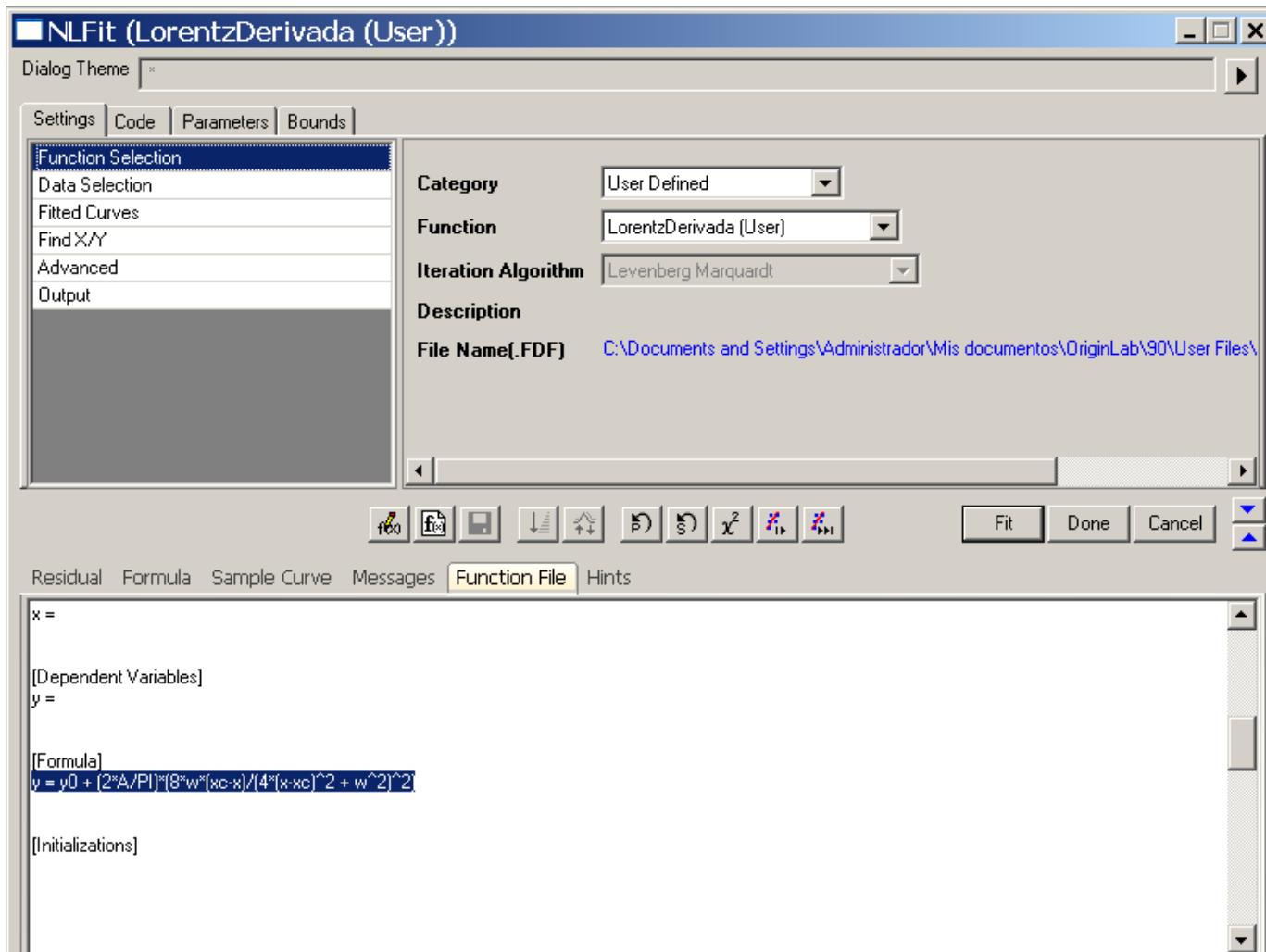
$$f_L(x) = y_0 + A \frac{1}{4(x - x_c)^2 + \Delta x^2}$$



1) Las derivadas de estas funciones no suelen venir definidas en los programas de ajuste, así que primero hay que crearlas.

$$y'_L = y_0 + (2*A/\pi)*(8*w*(x_c-x)/(4*(x-x_c)^2 + w^2)^2)$$

$$y'_G = y_0 + (4*A/(w^3*\sqrt{\pi/2}))*(\exp(-2*((x-x_c)/w)^2)*(x_c-x))$$



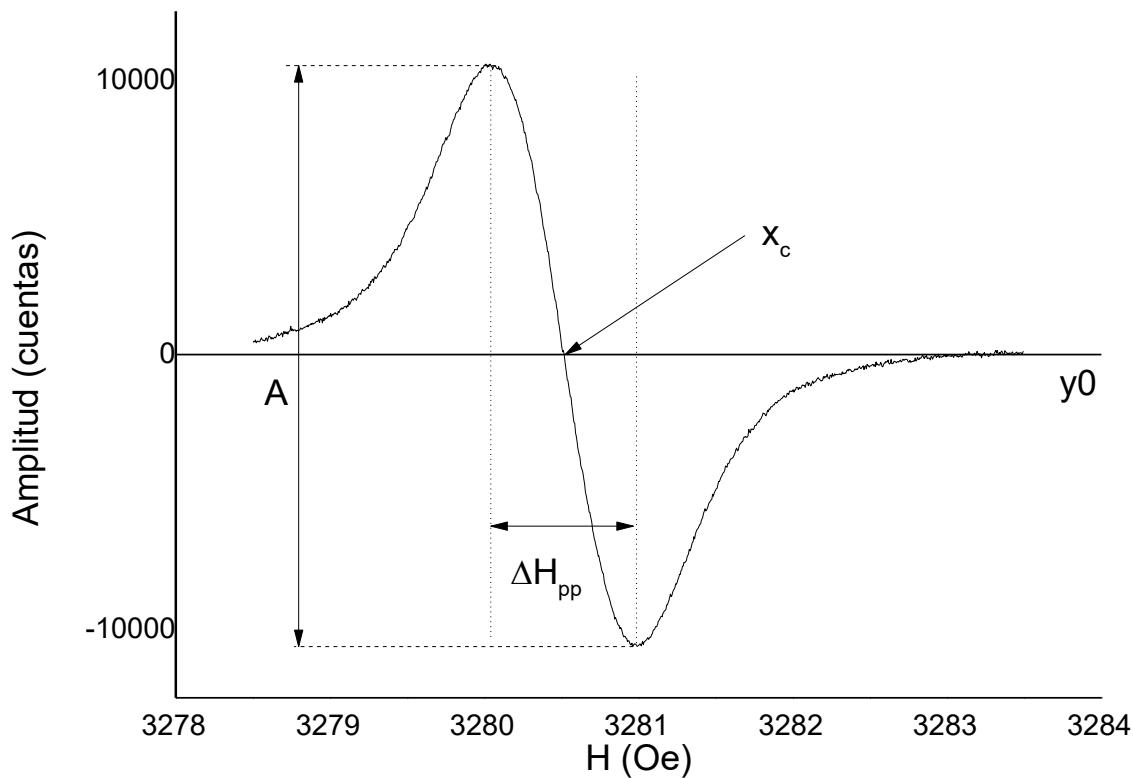
2) INICIALIZAR los parámetros lo mejor que se pueda.  
En este ejemplo:

$x_c \sim 3280.5$

$w \sim 1$  (depende de la función!)

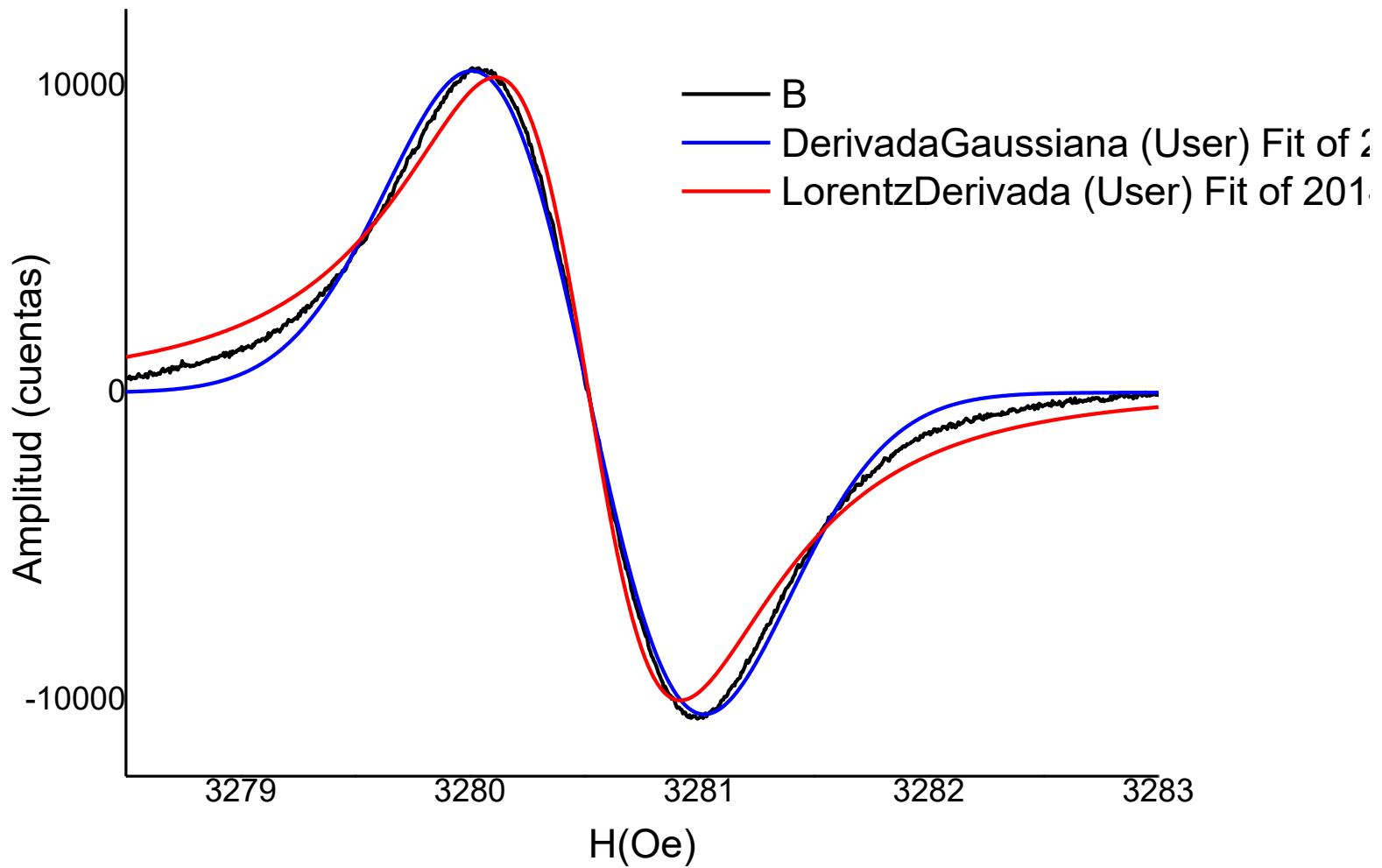
$y_0 \sim 0$

$A \sim 20000$  (si  $f$  está normalizada)

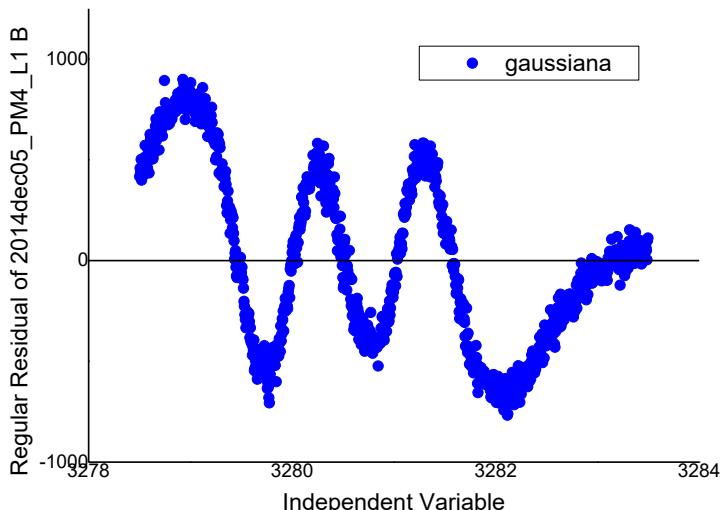


### 3) Ajustar.

- Conviene empezar con una iteración de Simplex antes de usar el L-M.
- Suele ser útil dejar uno o más parámetros fijos.
- Continuar hasta que se cumpla el criterio de convergencia.
- Modificar parámetros que nos parezcan mal ajustados y ver cómo se modifica el resto.

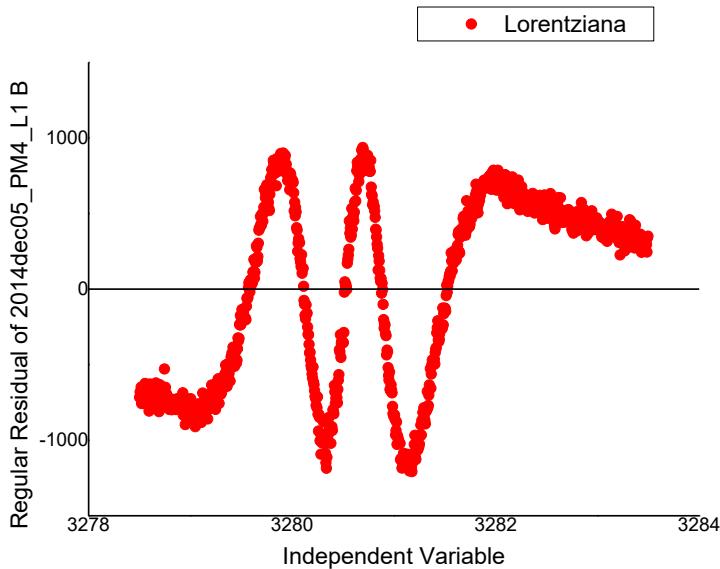


#### 4) Analizar errores del ajuste y curva de residuos.



	Value	Standard Error
$A$	11134.00092	--
$y_0$	-1.05575	13.7159
$w$	1.01391	0.00221
$x_c$	3280.51453	--

You may have overparameterized the fitting function. Fixing one of them may eliminate this problem.



	Value	Standard Error
$y_0$	120.9348	87.64724
$A$	23905.93808	748086.4778
$w$	1.39556	0.00709
$x_c$	3280.51392	513.19877

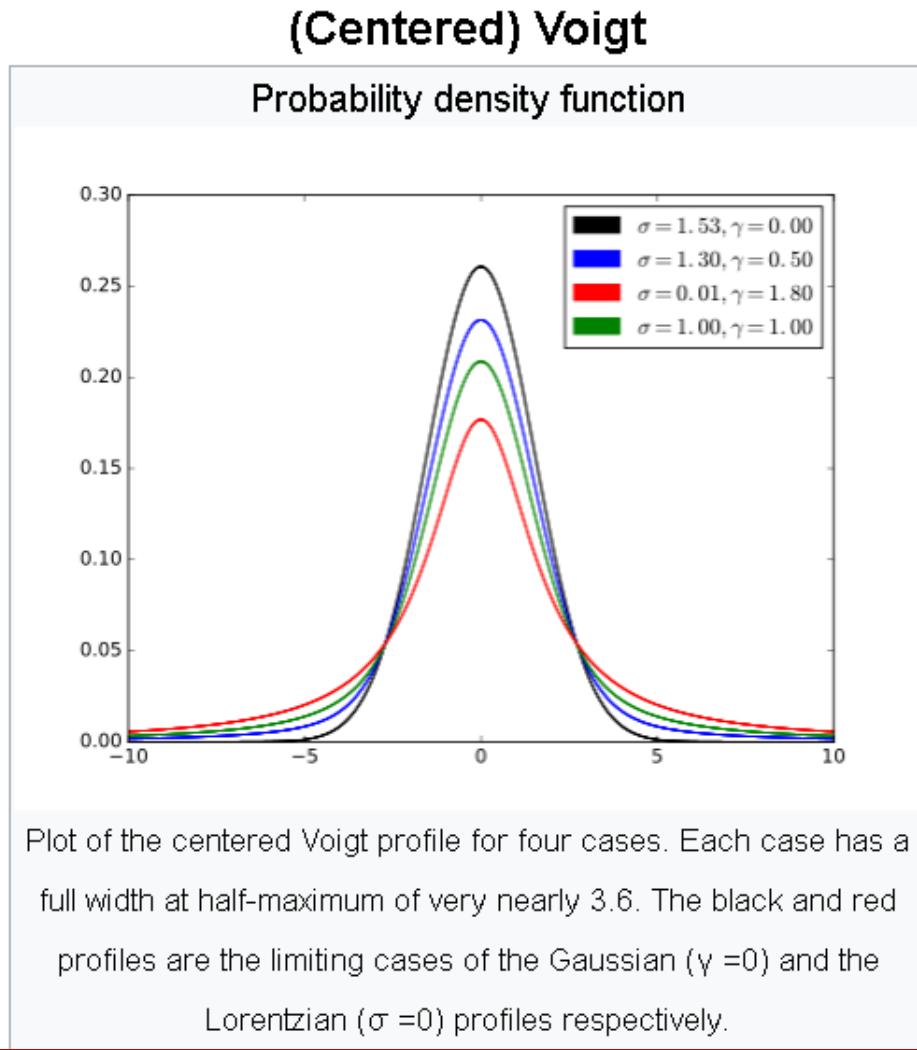
## 5) Conclusión

Ninguna de las dos funciones describe correctamente el espectro experimental.

Si solo quiero  $x_c$ ,  $w$  y  $A$   
⇒ Gaussiana OK

Si necesito ajustar mejor puedo usar  
Pseudo Voigt

$$V_p(x) = \eta f_L(x) + (1-\eta) f_G(x)$$
$$0 < \eta < 1$$



# Conclusiones

- ❖ Mediciones confiables: datos precisos y reproducibles. Teniendo los cuidados necesarios para descartar los errores sistemáticos.
- ❖ Elegir un modelo adecuado para ajustar los datos. Realizas el ajuste y encontrar los valores óptimos de los parámetros minimizando  $\chi^2$
- ❖ Limitar los parámetros de ajuste o limitar el rango de variación de parámetros cuando se tenga información adicional (aplicar restricciones en la minimización).
- ❖ La pregunta “¿mis datos son consistentes con el modelo propuesto?” se puede responder analizando el valor de  $\chi^2_N$ . Cuestionar el modelo si  $\chi^2_N > 1.5$

## Conclusiones

- ❖ Si hay varios modelos posibles utilizar  $\chi^2_N$  y criterios físicos para decidir qué modelo es el más apropiado.
- ❖ Si la calidad del ajuste es deficiente: (a) considere un modelo teórico diferente. b) si se sabe que el modelo teórico es válido para las condiciones del experimento, intente identificar defectos o ingredientes que no se han tenido en cuenta en el experimento o análisis. c) Evaluar rangos de aplicación del modelo.
- ❖ Cuando el ajuste es bueno, reportar los parámetros que minizan  $\chi^2$ .
- ❖ La incertidumbre de los parámetros se calcula a partir de la matriz de error y utilizar la raíz cuadrada de la diagonal

