

Física Experimental II

Laboratorio II

MMXXIII

--Theory is when one knows everything but nothing works--
--Practice is when everything works but nobody knows why--
--In our laboratory theory and practice go hand in hand:
NOTHING WORKS AND NOBODY KNOWS WHY !

¿Quiénes somos?

Nombre	Lugar de Trabajo
Fabian Bonetto	LCB (Laboratorio de Cavitación y Biotecnología)
Alejandro Butera	Resonancias Magnéticas
Sergio Encina	LASIE
Eduardo Martínez	Dispositivos y Sensores
Mauro Melone	Ciencia de Materiales
Julián Milano	Resonancias Magnéticas
Liliana Mogni	Ciencia de Materiales
Jorge Martín Núñez	Resonancias Magnéticas
Guillermo Rozas	Fotónica y Optoelectrónica
Leonardo Salazar Alarcón	Dispositivos y Sensores
Rodolfo Sánchez	Resonancias Magnéticas
Martín Saleta	Resonancias Magnéticas
Teobaldo Torres Molina	Física de Metales
Germán Zoja	Pañol Física Experimental IB
Tamara Guerrero	Pañol Física Experimental IB
Daniel Chueca	Pañol Física Experimental IB

E-mail cátedra: ib.experim2@gmail.com

Página web: <https://www.ib.edu.ar/fisica-exp/index.php/EXPERIM2>

<https://www.ib.edu.ar/fisica-exp/index.php/EXPERIM2>



[Página principal](#)
[Física Experimental I](#)
[Física Experimental II](#)
[Física Experimental III](#)
[Laboratorio Avanzado](#)
[Comité de Apoyo a la Física Experimental](#)

Herramientas

[Lo que enlaza aquí](#)
[Cambios relacionados](#)
[Páginas especiales](#)
[Versión para imprimir](#)
[Enlace permanente](#)
[Información de la página](#)

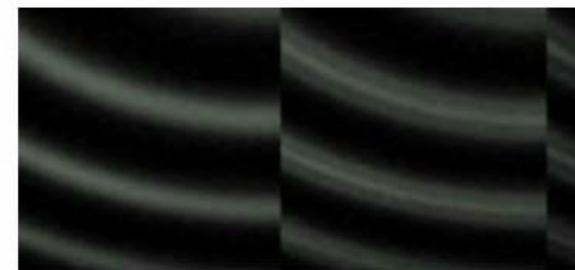
MediaWiki

[MediaWiki home](#)
[Ayuda](#)

EXPERIM2

Cátedra de Física Experimental 2 / Laboratorio II - 2023

Efecto Zeeman a $\lambda = 546.07$ nm con polarizador permitiendo solo el paso de las transiciones π para campos de 0.932 T, 1.38 T, 1.65 T y 1.94 T.



Cátedra

Alumnos 2023 (prácticas realizadas y en curso) 

Prácticas disponibles

Calendario, comienzo y fin de prácticas, temas de clases, fecha entrega informes 2023

Normas del Curso

Apuntes de Clase 2023

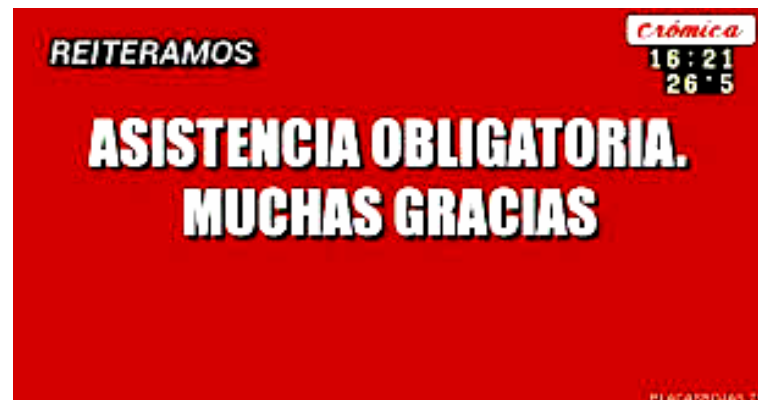
Manuales de uso y especificaciones técnicas de equipos del Laboratorio

Reglas del juego:

Días y horarios:

Lunes y miércoles de 14.45 a 19.45 hs

ASISTENCIA OBLIGATORIA



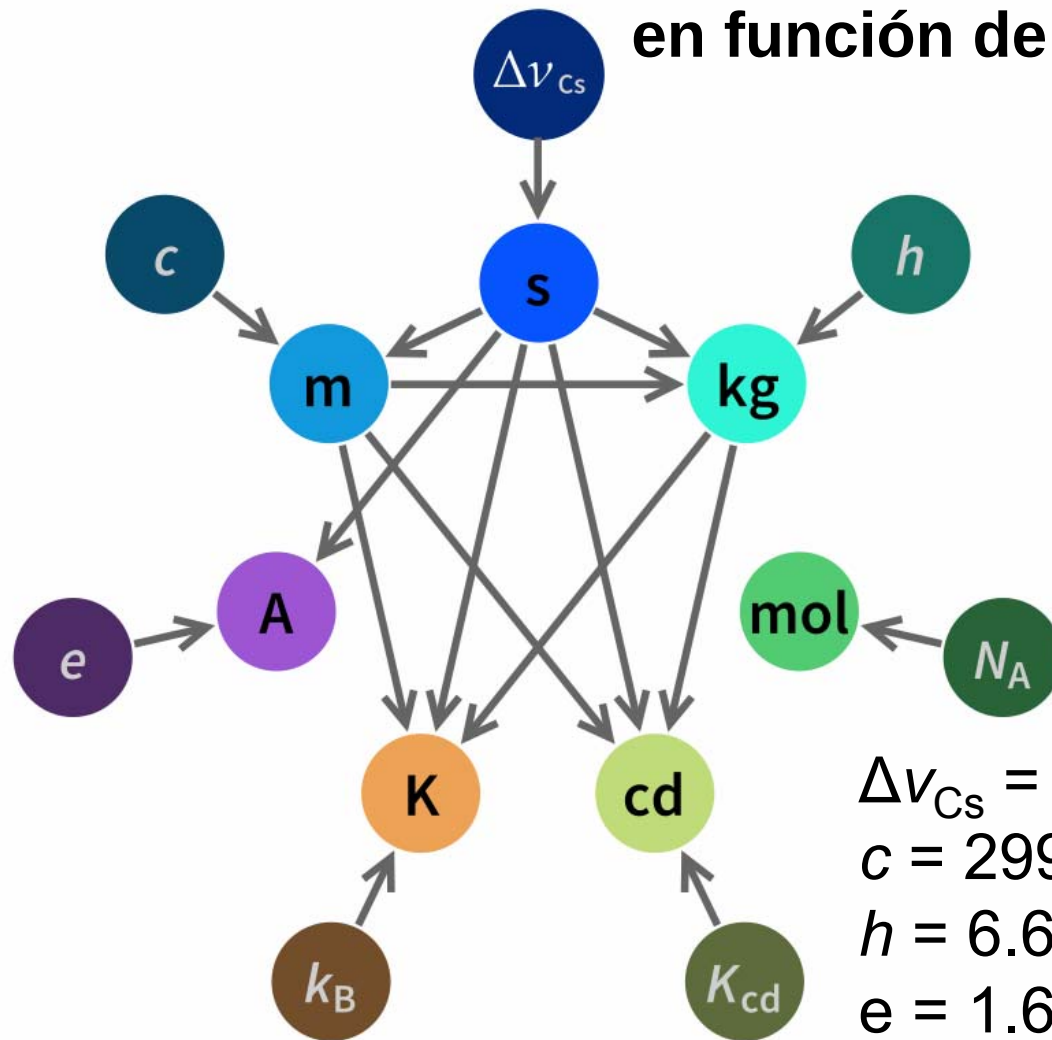
Experimentos:

-Cada estudiante realizará 4 experimentos (7 u 8 clases c/u) que deberán cubrir las categorías:

- **Físicos:**

- Utilización de un equipo de alto vacío.
- Experimento histórico/constante fundamental.*
- Medición propiedad física de un material.
- Adquisición de datos por computadora.

20 may 2019 - redefinición de las unidades base del SI en función de constantes universales



$$\Delta\nu_{\text{Cs}} = \Delta\nu(^{133}\text{Cs})_{\text{hfs}} = 9192631770 \text{ s}^{-1}$$

$$c = 299792458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$e = 1.602176634 \times 10^{-19} \text{ A} \cdot \text{s}$$

$$k_B = 1.380649 \times 10^{-23} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$$

$$N_A = 6.02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$K_{\text{cd}} = 683 \text{ cd} \cdot \text{sr} \cdot \text{s}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$$

Experimentos:

- Telecos:

Deberán hacer al menos **tres** experimentos clasificados como “de Telecomunicaciones”

- Física Médica:

Deberán hacer al menos un experimento orientado a Física Médica.

Práctica	HCF	PM	VA	ADQ	TEL	MED	DE
Corrientes de Foucault - Levitación y arrastre magnéticos		X		X			1
Adsorción de gases en sólidos		X					1
Susceptibilidad alterna en conductores- Skin depth		X		X	X		1/1
Determinación de la relación e/m del electrón por el método de Busch	X						1
Velocidad de la luz	X						1
Efecto Fotoeléctrico	X			X	X		1/1
Difracción con Ultrasonido					X		1/1
Espectro de radiación de un filamento	X			X			2
Difracción de luz por ultrasonido (Raman-Nath)		X		X	X		2/1
Transferencia de calor a través de un gas (Pirani)		X	X	X			2
Interacción de radiación gamma con la materia		X				X	2
Ruido Johnson: Fluctuaciones en una resistencia eléctrica	X			X	X		2/1
Experiencia de Franck y Hertz: Potenciales de ionización y excitación		X		X			2
Característica de emisión de antenas				X	X		2/1
Guía de ondas				X	X		2/2
Adquisición de datos sincrónica (lock-in)				X	X		2/1
Difracción de Rayos X		X				X	2
Dosimetría de Radiación Ionizante por EPR		X		X		X	2
Efecto Zeeman: Desdoblamiento de niveles cuánticos por campo magnético	X			X			3
Juntura semiconductor: Medición del gap de energía		X		X	X		3/2
Magnetómetro de muestra vibrante		X		X			3
Radiación de cuerpo negro (Stefan-Boltzmann)	X		X	X			3
Resistividad versus espesor en películas delgadas metálicas		X	X	X			3
Superconductividad y Termodinámica		X		X			3
SMOKE (efecto Kerr magneto-óptico superficial)		X		X			3
Lazo de seguimiento de fase (PLL Phase locked loop)				X	X		3/2
Soluciones Reales		X					3
Pinzas Ópticas		X			X		3/2

Equipos de Trabajo

- Para realizar los experimentos se formarán grupos de trabajo de **dos estudiantes**.
- Se espera que los grupos **no se repitan** para otras prácticas.
- Pueden formarse parejas F-F, T-T, F-T, T-F.
- (RESPETAR los protocolos Covid: Uso Barbijo, Distanciamiento, Ventilación, etc.)

Cronograma preliminar

2023						
	LUNES	MIERCOLES		Ferados	LUNES	MIERCOLES
	Laboratorio	Laboratorio		Fecha Entrega Inf.	Clases pizarrón (aula I - aulas nuevas)	
FEBRERO		1	PRACTICA I			Generalidades + Incertezas I
FEBRERO	6	8	8		incerteza II	Interfases + Leng. Phyton
FEBRERO	13	15			Labview	Vacio I (F) / Circ. Integrados (T)
FEBRERO	20	22			carnaval	Vacio II (F) / Circ. Integrados (T)
FEB/MAR	27	1	PRACTICA II		Ajuste no lineal	Escritura de informes
MARZO	6	8	8		Amplificador Lock-In	Cómo dar una charla
MARZO	13	15		1er informe 15/03/2023		
MARZO	20	22			2-charlitas	2-charlitas
MARZO	27	29			2-charlitas	2-charlitas
ABRIL	3	5			Semanita	Semanita
ABRIL	10	12	PRACTICA III	2do informe 12/4/2023	2-charlitas	2-charlitas
ABRIL	17	19	7		2-charlitas	2-charlitas
ABRIL	24	26			2-charlitas	2-charlitas
MAYO	1	3			feriado	2-charlitas
MAYO	8	10	PRACTICA IV		2-charlitas	2-charlitas
MAYO	15	17	7	3er informe 17/5/2023		
MAYO	22	24				
MAYO	29	31		Exposición POSTERS		

Entrega de Informes

- **DOS semanas** luego de la finalización del experimento, hasta las 23:59 hs.
- No se aceptarán entregas tardías. Un informe no entregado a tiempo significa un experimento **no aprobado**.
- Los informes se entregarán en formato electrónico PDF a ib.experim2@gmail.com. Extensión aproximada **5 páginas**.
- Puede presentarse un **pre-informe** a alguno de los docentes antes de la fecha de entrega.
- El informe del **último experimento** se presentará en forma de **póster** la última clase del curso.

Clases de pizarrón

- Durante la primera mitad del cuatrimestre se dictarán clases en el pizarrón que cubrirán técnicas habituales de laboratorio como vacío, incerteza en las mediciones, ajuste de datos, interfaces, adquisición de datos en forma automática, amplificador Lock-in, etc.

Charlas por parte de los estudiantes

- Durante la segunda mitad del cuatrimestre cada estudiante dará una charla sobre alguna de las prácticas que realizó. La duración de la misma será de **20 minutos** más 10 minutos de preguntas y discusión.

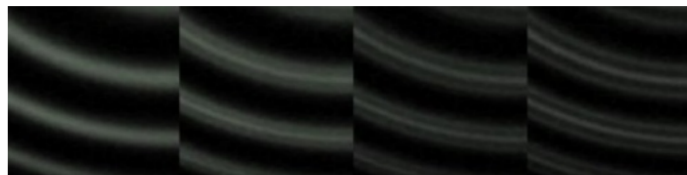
Nota Final

- Se elaborará una nota de concepto final sobre la base de las notas de los informes, la manera de trabajar en el laboratorio, la charla individual y el examen final.

Examen Final

- Habrá que exponer sobre las prácticas realizadas por el estudiante en el cuatrimestre.
- Se harán preguntas sobre los temas dados en clase.
- Es condición necesaria aprobar este examen para hacer lo propio con la materia.

Efecto Zeeman a $\lambda = 5460.7 \text{ \AA}$ con polarizador permitiendo solo el paso de las transiciones π para campos de 0.932 T, 1.38 T, 1.65 T y 1.94 T.



Alumnos 2022 (prácticas realizadas y en curso)

Calendario, comienzo y fin de prácticas, temas de clases, fecha entrega informes 2022 [editar]

Alumnos2023 : practicas

[illegible]

Práctica	HCF	PM	VA	ADQ	TEL	MED	DE
Corrientes de Foucault - Levitación y arrastre magnéticos		X		X			1
Adsorción de gases en sólidos		X					1
Susceptibilidad alterna en conductores- Skin depth		X		X	X		1/1
Determinación de la relación e/m del electrón por el método de Busch	X						1
Velocidad de la luz	X						1
Efecto Fotoeléctrico	X			X	X		1/1
Difracción con Ultrasonido					X		1/1
Espectro de radiación de un filamento	X			X			2
Difracción de luz por ultrasonido (Raman-Nath)		X		X	X		2/1
Transferencia de calor a través de un gas (Pirani)		X	X	X			2
Interacción de radiación gamma con la materia		X				X	2
Ruido Johnson: Fluctuaciones en una resistencia eléctrica	X			X	X		2/1
Experiencia de Franck y Hertz: Potenciales de ionización y excitación		X		X			2
Característica de emisión de antenas				X	X		2/1
Guía de ondas				X	X		2/2
Adquisición de datos sincrónica (lock-in)				X	X		2/1
Difracción de Rayos X		X				X	2
Dosimetría de Radiación Ionizante por EPR		X		X		X	2
Efecto Zeeman: Desdoblamiento de niveles cuánticos por campo magnético	X			X			3
Juntura semiconductor: Medición del gap de energía		X		X	X		3/2
Magnetómetro de muestra vibrante		X		X			3
Radiación de cuerpo negro (Stefan-Boltzmann)	X		X	X			3
Resistividad versus espesor en películas delgadas metálicas		X	X	X			3
Superconductividad y Termodinámica		X		X			3
SMOKE (efecto Kerr magneto-óptico superficial)		X		X			3
Lazo de seguimiento de fase (PLL Phase locked loop)				X	X		3/2
Soluciones Reales		X					3
Pinzas Ópticas		X			X		3/2

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

Tratamiento de las incertezas en la medición

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.

Alejandro Butera, Lab. de Resonancias Magnéticas, butera@cab.cnea.gov.ar

Repaso

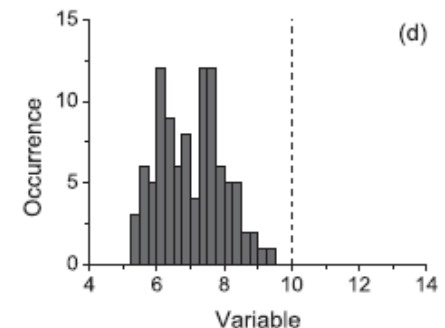
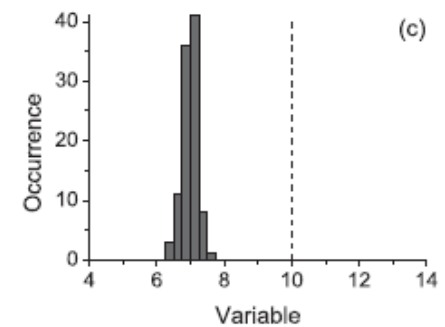
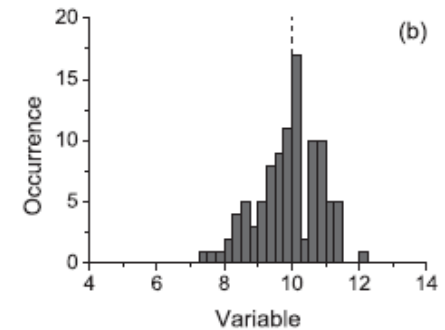
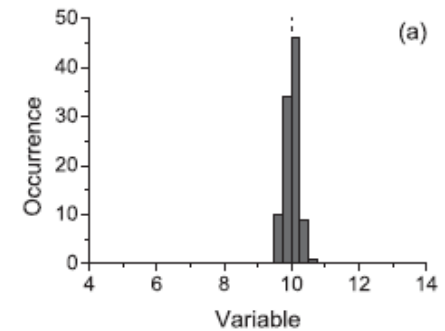
Definiciones:

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

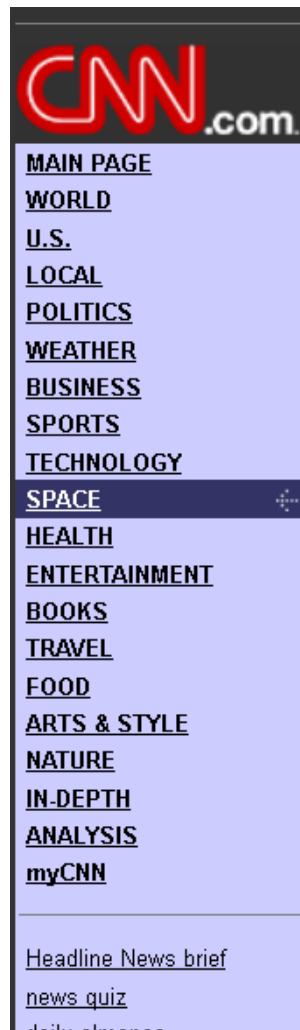
Exactitud: Los resultados del experimento están de acuerdo con el valor aceptado o calculado de la variable medida.

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.



OJO con las Equivocaciones en las unidades



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

[banner](#)

FUEL

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 system process manages the entire mission. *Flight 143.*

With FQIS out-of-order, the ground maintenance process called "dipping the tanks."



NASA's Climate Orbiter was lost September 23, 1999



f : frecuencia

ω : frecuencia angular

$$\omega = 2\pi f$$

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.
- 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 ser mágico cuando se adquiere con computadora...

Errores aleatorios en mediciones

Mido N puntos y construyo un histograma.

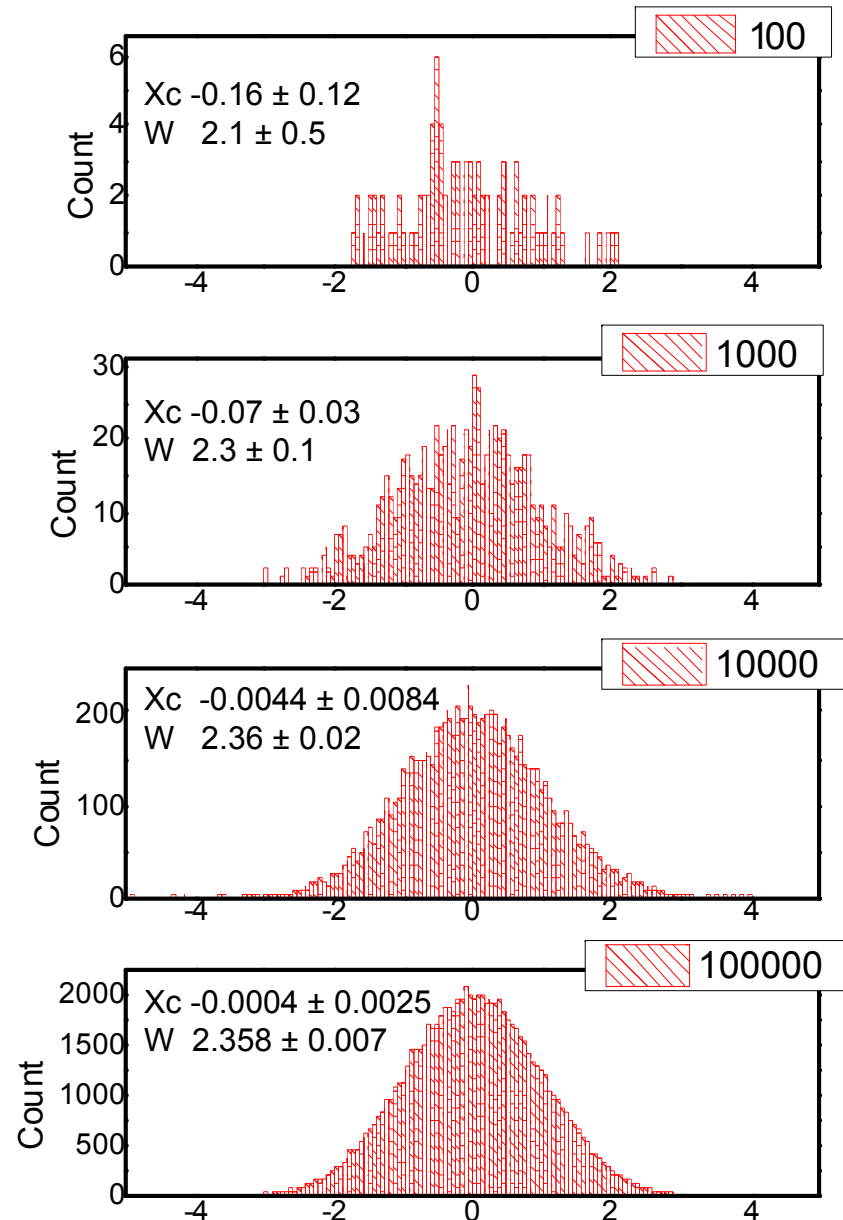
Si tomo más puntos:

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

Si ajusto los histogramas con una curva gaussiana, es evidente que la determinación del promedio y de la desviación estándar mejora cuando tengo más datos.

¿Cómo estimar el “ancho” cuando tenemos pocos puntos? ($N \sim 10$)

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

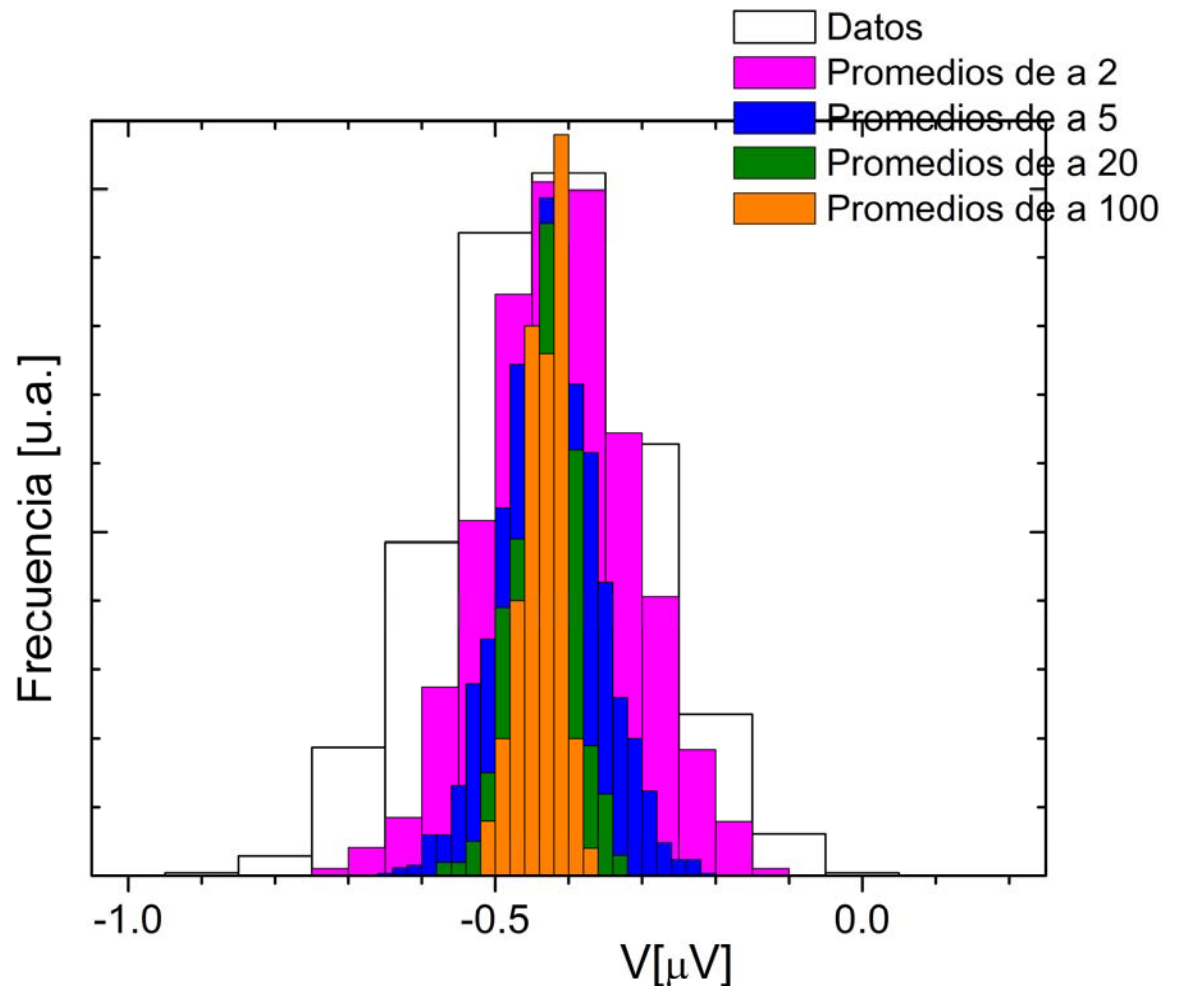


Tratamiento estadístico

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

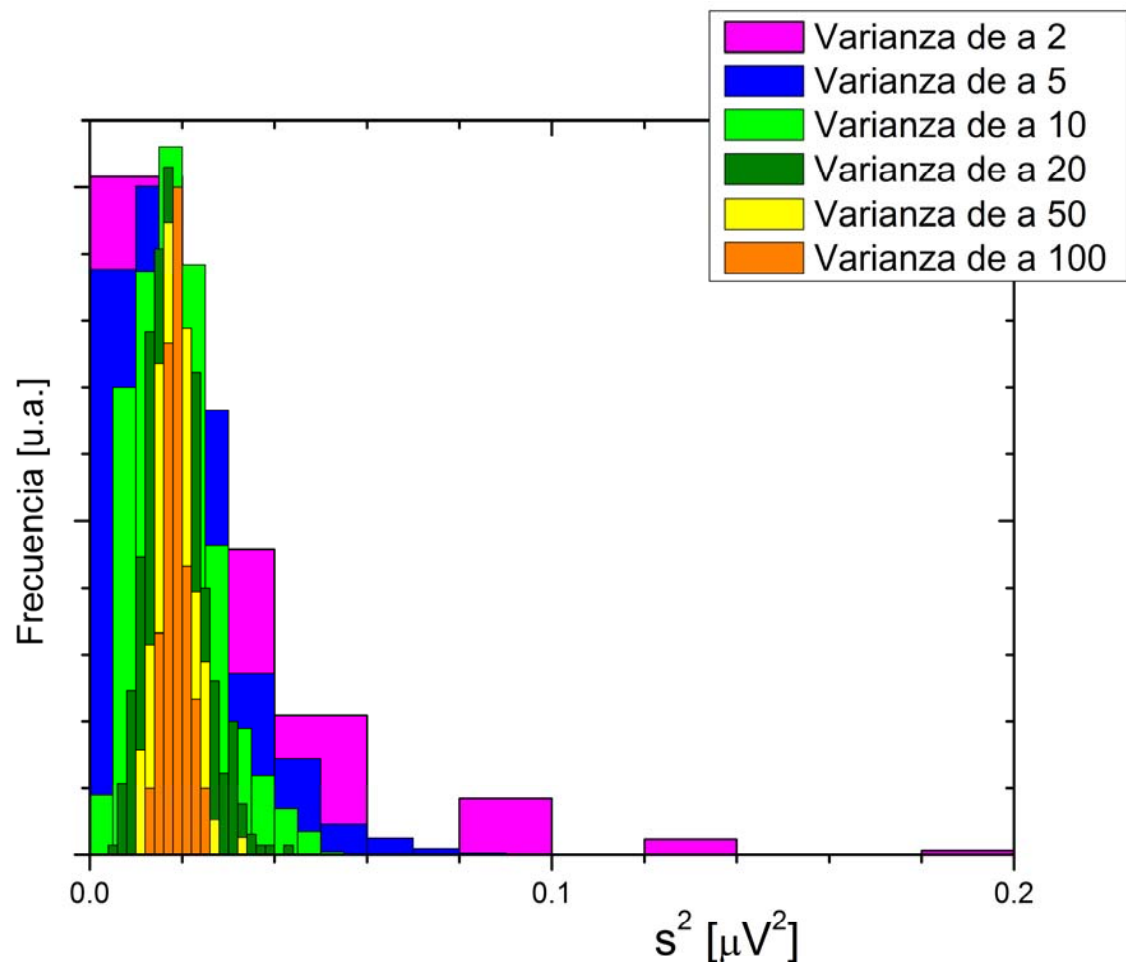
$\sigma_{\bar{X}}$ es un buen estimador
de la incerteza en $\bar{X}$

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



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

Podemos construir también los histogramas de la variancia σ^2 (o la desviación estándar σ) en datos agrupados de a N y ver que a medida que aumenta N , el valor de σ^2 no cambia, pero también queda definido con más precisión.



Modelo para errores aleatorios

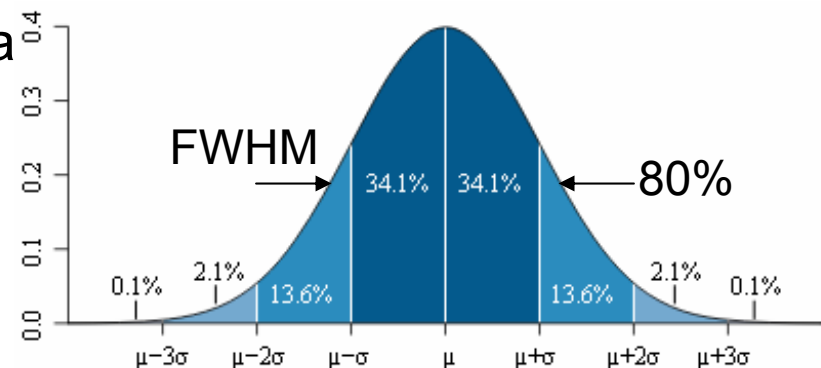
- El ruido es aleatorio y no correlacionado.
- El ruido es aditivo con la señal y no modifica el “valor verdadero” μ ,
 $x = \mu + x_r$ $\langle x_r \rangle = 0$.
- Ignoraremos la discretización introducida por el instrumento, o sea que haremos una teoría de variable continua.
- Con estas condiciones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

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

σ_μ indica los puntos de inflexión de la curva y está relacionado con:

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

que suele ser la cantidad que se mide experimentalmente.



teorema central del límite

$$\sigma_{\bar{x}} \sim \sigma_x / \sqrt{N}$$

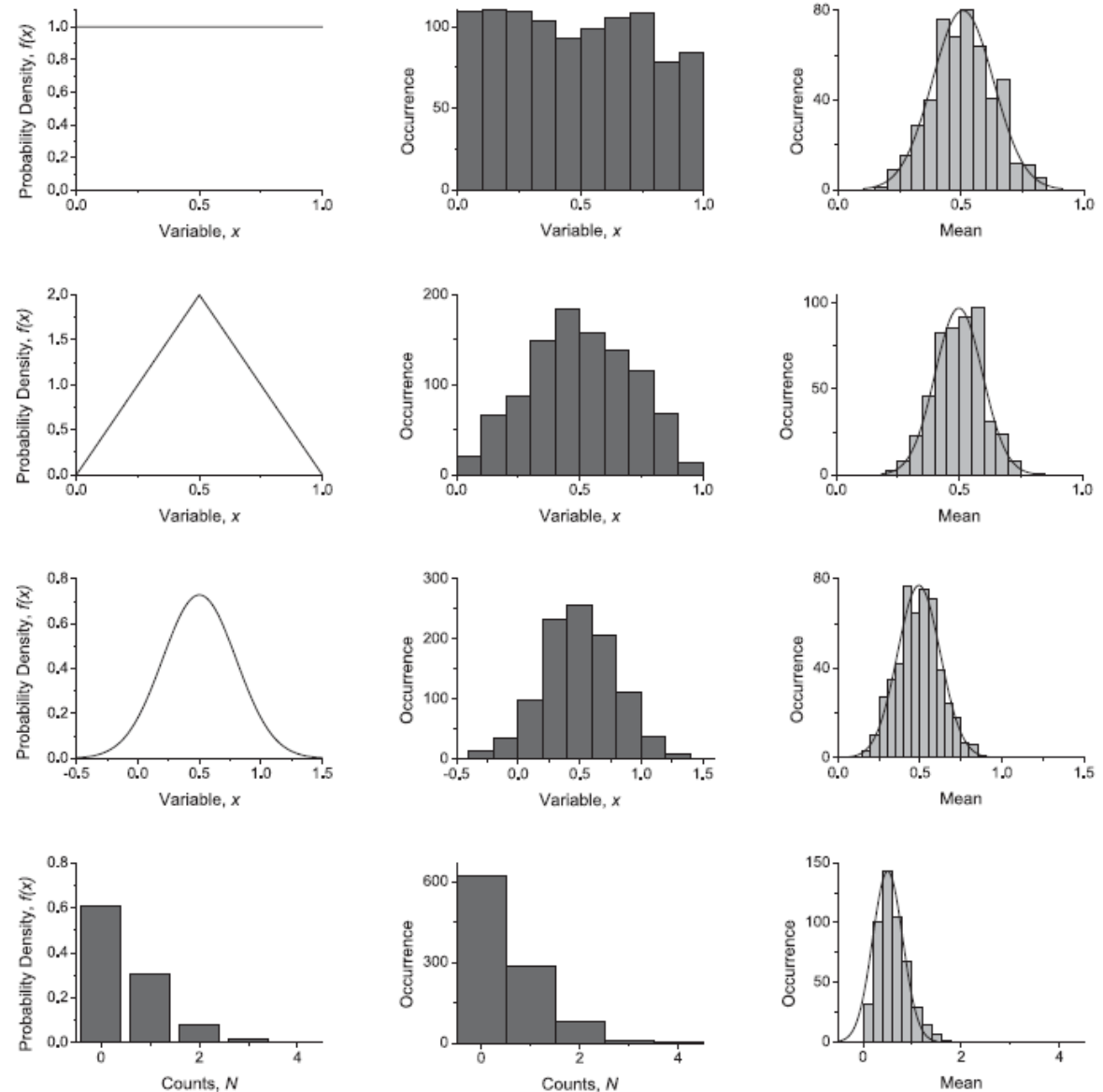


Fig. 3.7 Illustration of the central limit theorem. The first column shows four different probability distribution functions. The first three are for the continuous variable x , and have a mean of $\bar{x} = 0.5$. The last is a Poisson distribution with mean count $\bar{N} = 0.5$. The second column plots the outcome of 1000 computer-generated trials of choosing the variable from the appropriate distribution function. There are statistical fluctuations in the computer-generated data, but the shapes of the sample distributions match those of the population distribution. The third column shows the results of another computer-generated set of experiments, where five numbers are chosen from the parent distribution and averaged; this procedure was repeated 1000 times. The distribution of these 1000 means is plotted, and is seen in each case to follow a Gaussian distribution (the continuous curve superimposed on the histograms). The standard deviation of the distributions in the third column is $\sqrt{5}$ smaller than the parent standard deviations in the first columns as five data points were used to generate the average.

Modelo para errores aleatorios

- ¿Cómo estimo μ y σ a partir de los datos experimentales?
- Estimación (o principio) de **máxima verosimilitud**.
- Dado un conjunto de valores x_i , $i=1, \dots, N$, que son fijos, si conociera la función de distribución, μ y σ_μ , la probabilidad de medir esos valores sería (función de verosimilitud):

$$P \sim \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_\mu} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x_i - \mu}{\sigma_\mu} \right)^2} \qquad P \sim \frac{1}{\sigma_\mu^N} e^{-\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \left(\frac{x_i - \mu}{\sigma_\mu} \right)^2}$$

- Los mejores “estimadores” para μ y σ salen de maximizar P (o más convenientemente el $\ln P$)

$$\ln P = N \ln \sigma_\mu + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \left(\frac{x_i - \mu}{\sigma_\mu} \right)^2$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^N (x_i - \mu) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mu_0 = \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

$$\frac{\partial \ln P}{\partial \sigma_\mu} = \frac{N}{\sigma_\mu} - \frac{1}{\sigma_\mu^3} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \sigma_0^2 = s^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2$$

Pero ojo, no es estrictamente correcto reemplazar μ por $\bar{x}$

$$\begin{aligned} N\sigma_0^2 &= \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x} + \bar{x} - \mu)^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{i=1}^N (\bar{x} - \mu)^2 \right\rangle + 2 \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(\bar{x} - \mu) \right\rangle \\ &\quad \bar{x} = G(\mu, \sigma_\mu / \sqrt{N}) \Rightarrow N \cdot \sigma_0^2 / N \end{aligned}$$

$$\sigma_0^2 = \frac{1}{N-1} \left\langle \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right\rangle \Rightarrow \sigma_0^2 = s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2$$

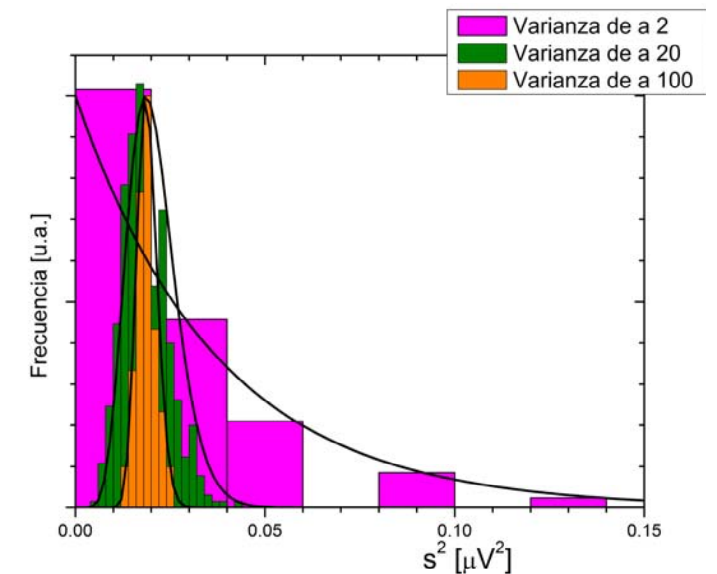
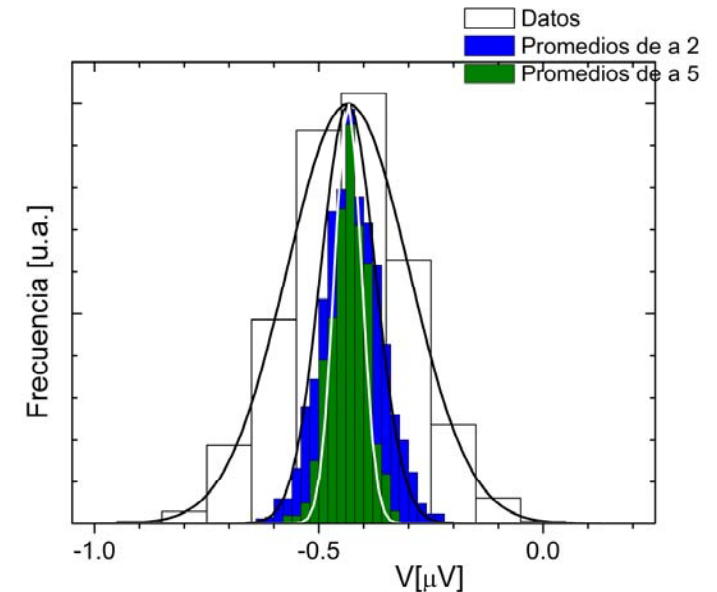
Resumiendo:

$$\bar{x} = G\left(\mu, \frac{\sigma_{\mu}}{\sqrt{N}}\right)$$

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

$$(N-1) \frac{s^2}{\sigma^2} \Rightarrow \chi^2(x, N) = \frac{x^{\frac{N}{2}-1} e^{-\frac{x}{2}}}{2^{\frac{N}{2}} \Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}$$

La función “Chi cuadrado” solo toma valores positivos y es asimétrica. Su valor medio es N y su desviación estándar, $\sigma_{\chi^2} = \sqrt{2N}$ lo que justifica que en general los errores se reporten con solo una cifra significativa.



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.

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

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 ± 200 como $(50 \pm 2) \times 10^2$.

→ Usar 2.23153(5) para reportar 2.23153 ± 0.00005 .

5. Incluir las UNIDADES.

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

$\bar{Z} \pm \sigma_Z$ a partir de $\bar{A} \pm \sigma_A$

Puedo usar

- MÉTODO FUNCIONAL
- MÉTODO ANALÍTICO

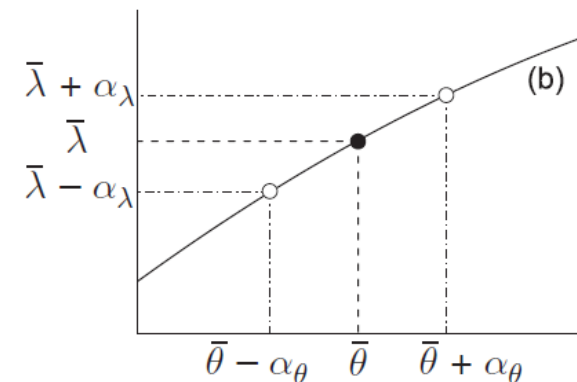
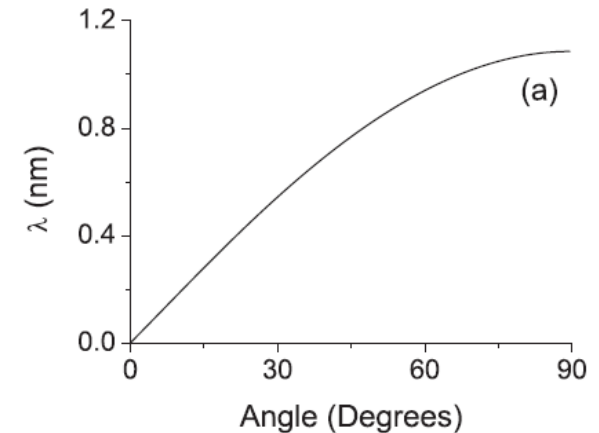
MÉTODO FUNCIONAL

Evalúo:

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

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

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

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

EJEMPLO

$$Z = 10^A$$

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

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

MÉTODO FUNCIONAL

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

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

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

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

MÉTODO ANALÍTICO

$$\sigma_Z = Z \ln(10) \sigma_A = 46$$

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

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

IMPORTANTE

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

The results for the trigonometric functions assume that the angles and their errors are in radians.

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	$10^A \ln(10)$	$\alpha_Z = 10^A \ln(10) \alpha_A$
$\sin A$	$\cos A$	$\alpha_Z = \cos A \alpha_A$
$\cos A$	$-\sin A$	$\alpha_Z = \sin A \alpha_A$
$\tan A$	$1 + \tan^2 A$	$\alpha_Z = (1 + Z^2) \alpha_A$

¿Qué pasa si mido en $A=0$?

FUNCIONES QUE DEPENDEN DE MÁS DE UNA VARIABLE.

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

MÉTODO FUNCIONAL

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

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

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

MÉTODO ANALÍTICO

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

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.*Always perform a quick check for dominant errors before using these formulae.*

Function, Z (A)	Expression used to calculate α_Z
$\left. \begin{array}{l} Z = A + B \\ Z = A - B \end{array} \right\}$	$\alpha_Z = \sqrt{(\alpha_A)^2 + (\alpha_B)^2}$
$\left. \begin{array}{l} Z = A \times B \\ Z = \frac{A}{B} \end{array} \right\}$	$\frac{\alpha_Z}{Z} = \sqrt{\left(\frac{\alpha_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_B}{B}\right)^2}$
$Z = A^n$	$\left \frac{\alpha_Z}{Z} \right = \left n \frac{\alpha_A}{A} \right $
$Z = kA$	$\alpha_Z = k \alpha_A \quad \text{OR} \quad \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

-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 .

Estrategias experimentales basadas en el análisis de las incertezas

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

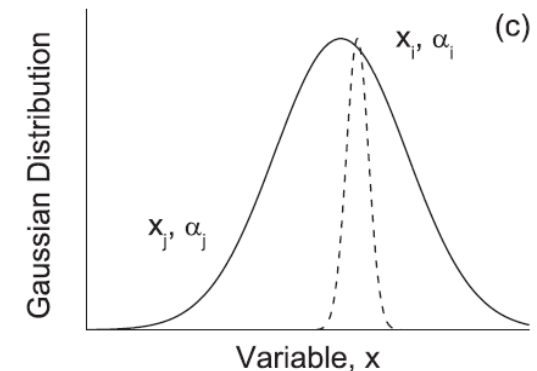
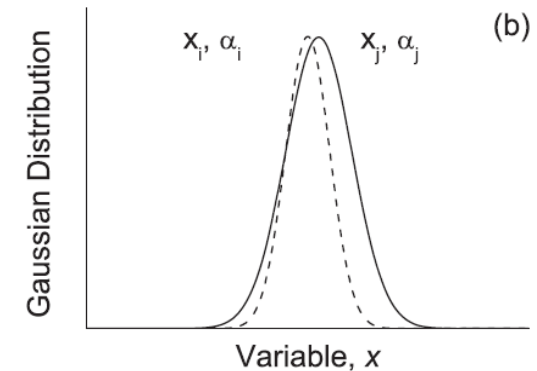
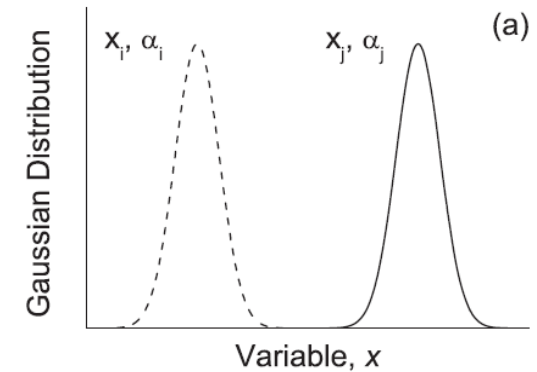
Supongamos que dos alumnos midieron una magnitud x y obtuvieron $x_A \pm \sigma_A$ y $x_B \pm \sigma_B$ y queremos obtener una única estimación de x .

IMPORTANTE 1:

El promedio tiene sentido si $|x_A - x_B| < \sigma_A, \sigma_B$

IMPORTANTE 2:

El promedio tiene sentido si $\sigma_A \sim \sigma_B$



Aplicamos la función o principio de máxima verosimilitud, asumiendo distribuciones Gaussianas de valor real X y desviación estándar σ_i .

La probabilidad conjunta que A obtenga x_A y B x_B viene dada por:

$$P_X(x_A, x_B) = P_X(x_A)P_X(x_B) \propto \frac{1}{\sigma_A} e^{-\frac{(x_A - X)^2}{2\sigma_A^2}} \frac{1}{\sigma_B} e^{-\frac{(x_B - X)^2}{2\sigma_B^2}} =$$

$$\propto \frac{1}{\sigma_A \sigma_B} e^{-\chi^2/2}, \quad \chi^2 = \frac{(x_A - X)^2}{\sigma_A^2} + \frac{(x_B - X)^2}{\sigma_B^2}$$

El Principio de Máxima Verosimilitud nos dice que el mejor estimador para X es el que maximiza la probabilidad o bien minimiza χ^2 .

$$\frac{d\chi^2}{dX} = 0 = \frac{2(x_A - X)}{\sigma_A^2} + \frac{2(x_B - X)}{\sigma_B^2} \Rightarrow x_{av} = \frac{\frac{x_A}{\sigma_A^2} + \frac{x_B}{\sigma_B^2}}{\frac{1}{\sigma_A^2} + \frac{1}{\sigma_B^2}} = \frac{w_A x_A + w_B x_B}{w_A + w_B}$$

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 σ_i son todos iguales se recupera el resultado:

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

INSTRUMENTOS DIGITALES

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

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

El resultado da

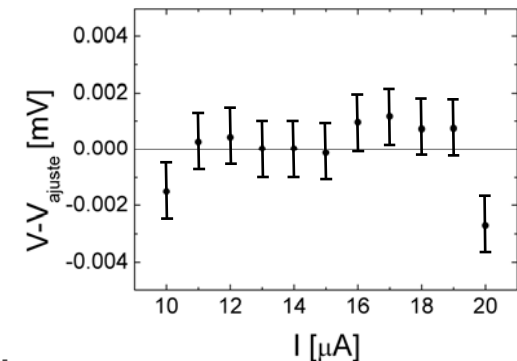
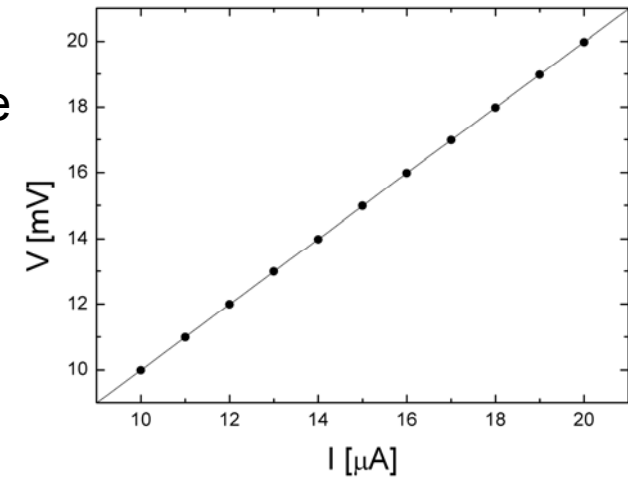
$$V = (1 \pm 2) \mu V + (999.0 \pm 0.1) \Omega \times I$$

¿Qué valor de R y de su incerteza reporto?

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

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

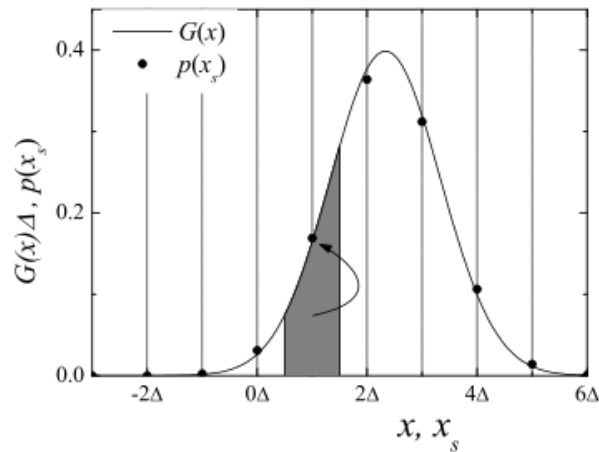
$$\begin{aligned} \left(\frac{s_R}{R}\right)^2 &= \left(\frac{s_\alpha}{\alpha}\right)^2 + \left(\frac{s_\beta}{\beta}\right)^2 + \left(\frac{s_{R_{aj}}}{R_{aj}}\right)^2 = (10^{-3})^2 + (10^{-4})^2 + (10^{-4})^2 \\ &= (10^{-3})^2 \implies s_R = 1\Omega \end{aligned}$$



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

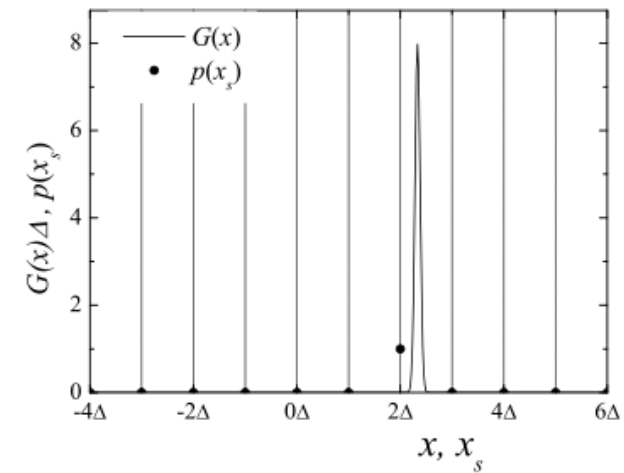
INSTRUMENTOS DIGITALES

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?



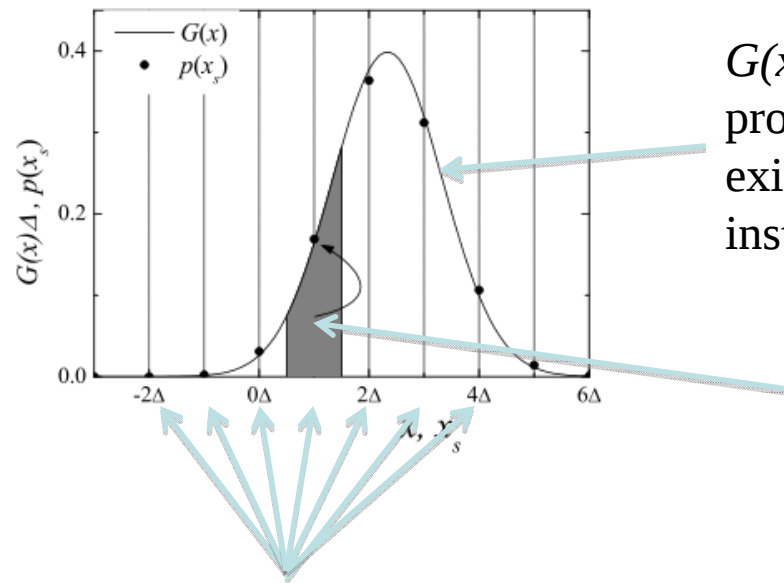
Si el ruido es muy grande comparado con el LSB, $(\sigma \gg \Delta)$, puedo olvidarme de la discretización y seguir trabajando con la teoría gaussiana continua.

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 $\text{LSB} / 2$ 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?



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

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

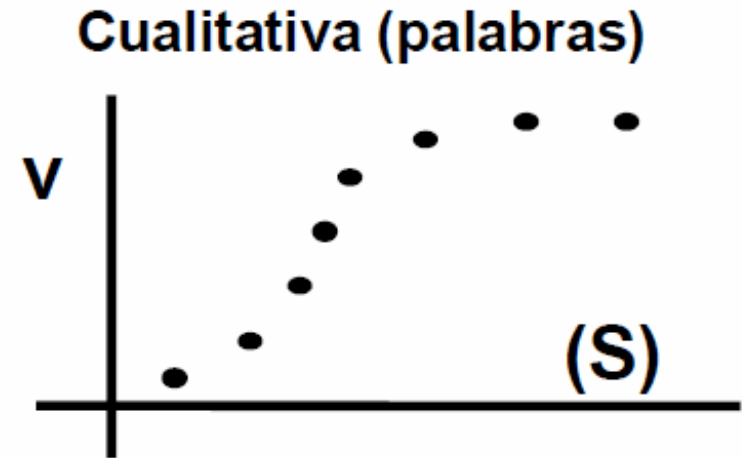
Valores
posibles de la
lectura, $n\Delta$

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

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

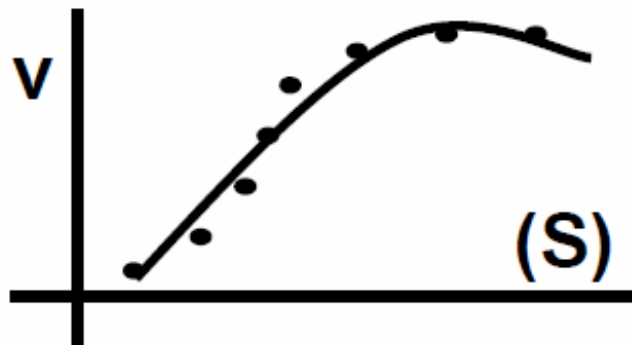
¿Qué hago con mis datos experimentales?

- Descripción cualitativa, por ej.:
“v aumenta con S y tiende a saturar”
- Descripción cuantitativa:
 - Modelo empírico, por ej. Polinomio, permite interpolar datos.
 - Modelo fenomenológico/teórico.
Permite contrastar con un modelo físico del fenómeno medido.

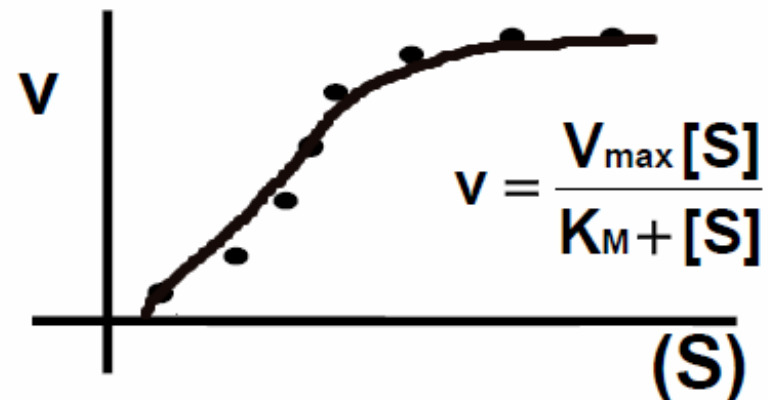


Modelización Empírica

$$v = a + b[S] + c[S]^2$$

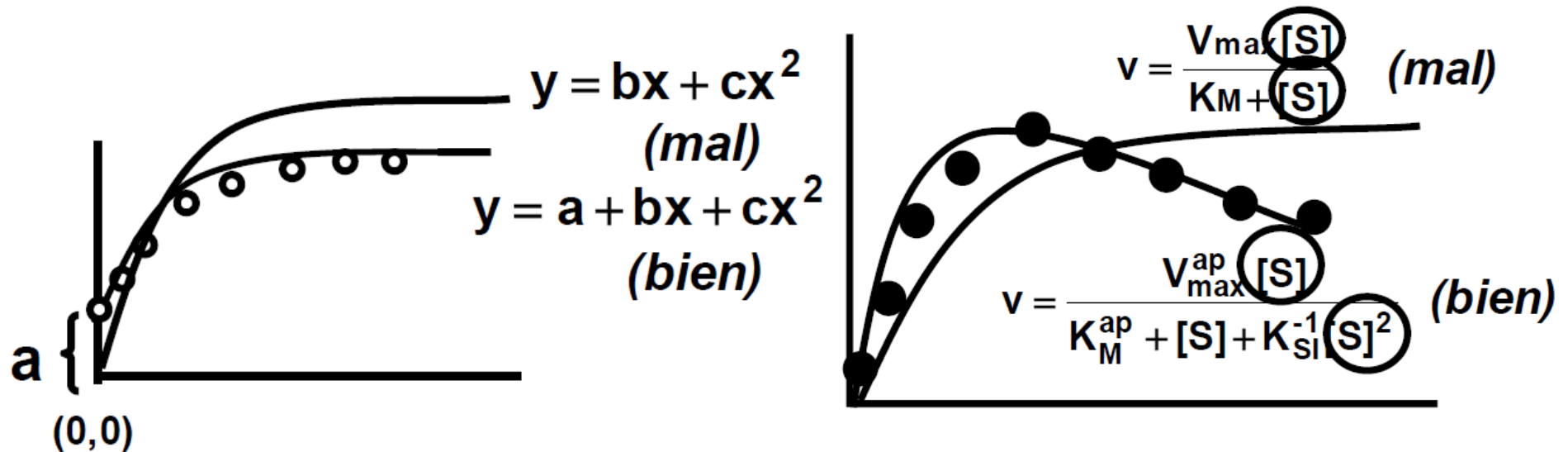


Modelización Teórica



¿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**:



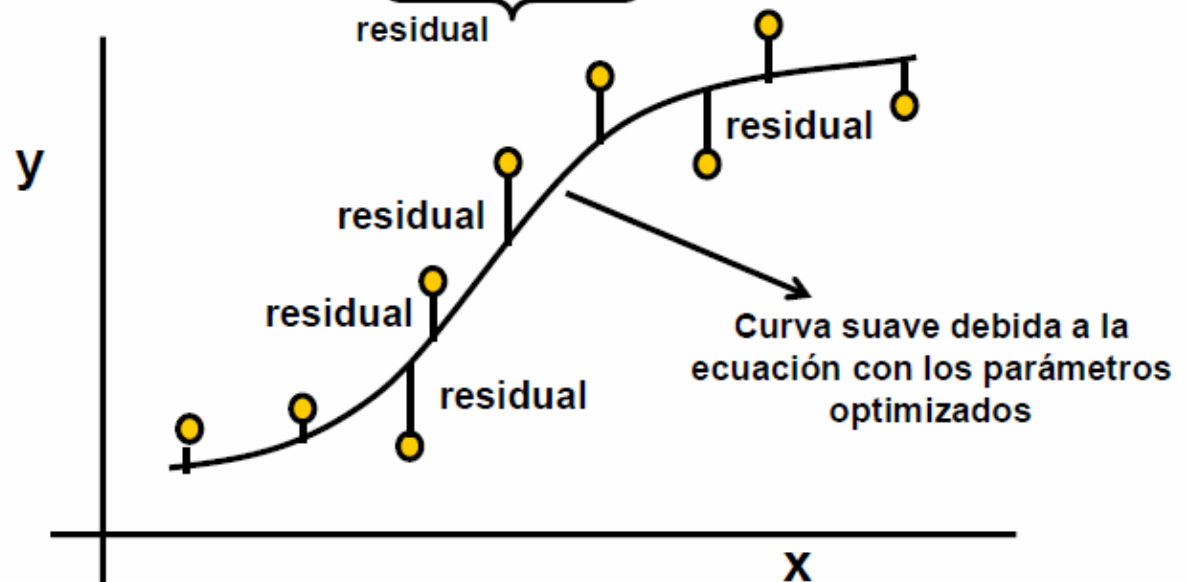
¿Qué hago con mis datos experimentales?

- 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” $\Rightarrow$ hallar parámetros que mejor ajusten los datos.

MÉTODO DE CUADRADOS MÍNIMOS

Minimizar residuales al cuadrado (Mínimos Cuadrados)

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



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 χ^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:

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_i} = 0$$

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 pueden describirse con $y=f(x)=A+Bx$,
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 $\sigma_{x_i}=0$ y que los σ_{y_i} 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

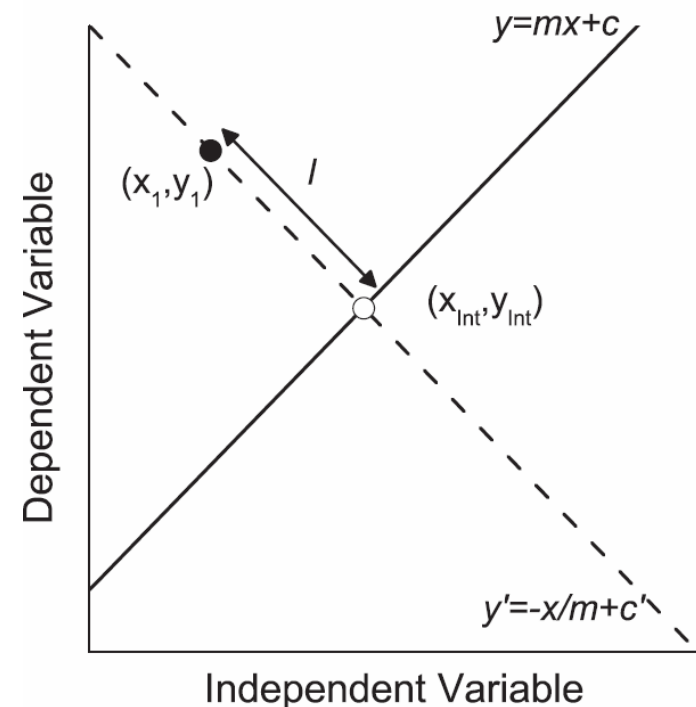
Si $\sigma_{x_i} \sim \sigma_{y_i}$ debo considerarlo en el denominador de la función $\chi^2 \rightarrow$ las ecuaciones dejan de ser lineales.

Consejo: siempre definir como variable independiente la de menor incerteza

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

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

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

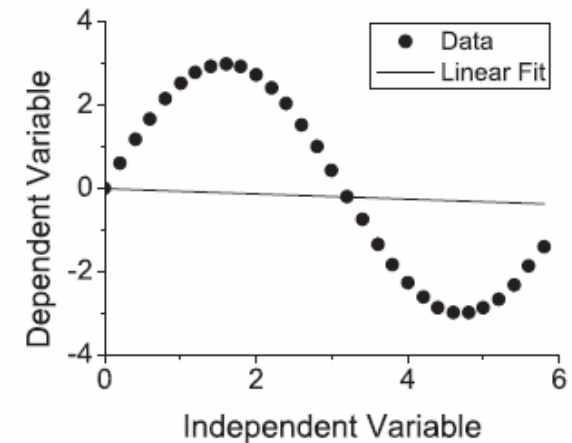
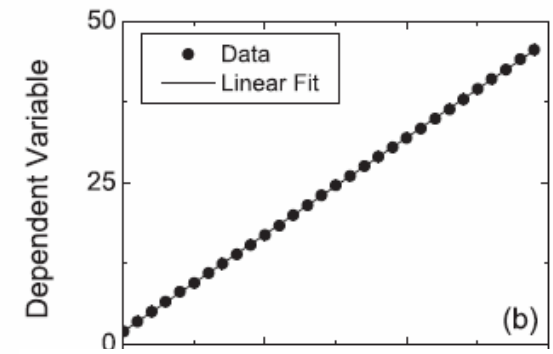
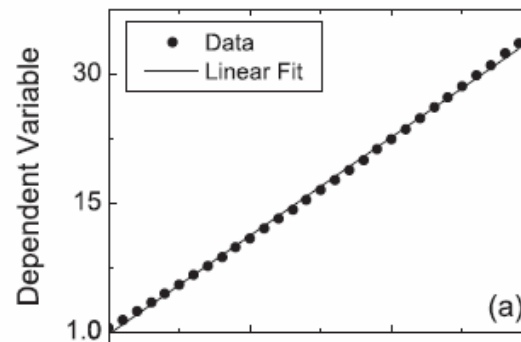


Fig. 5.9 The least-squares best-fit straight line to a sinusoidal variation. Error bars smaller than symbol size. **Health warning** It is possible to use the method of least squares to find the 'best-fit' straight line for *any* data set. This *does not* mean that a linear fit is an appropriate theoretical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

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

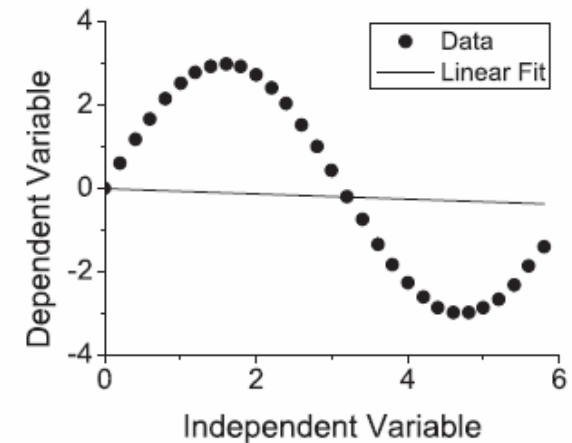
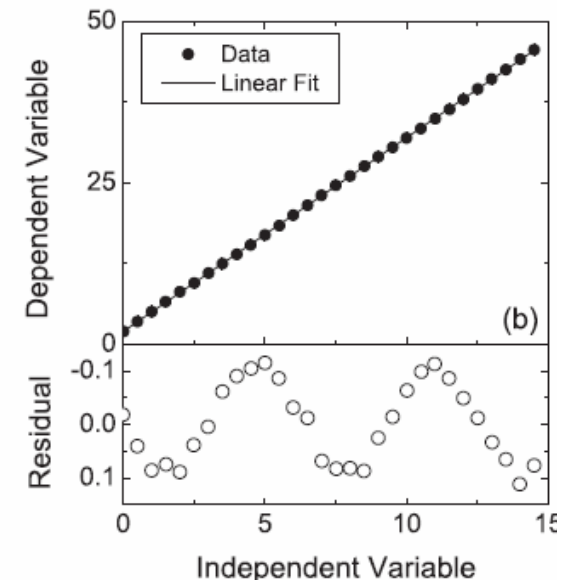
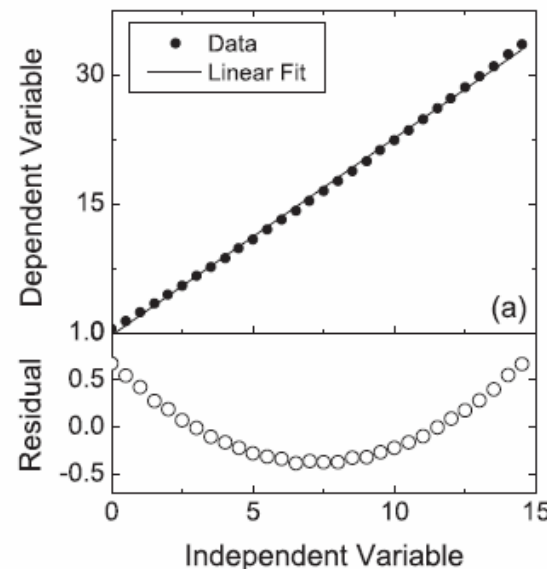
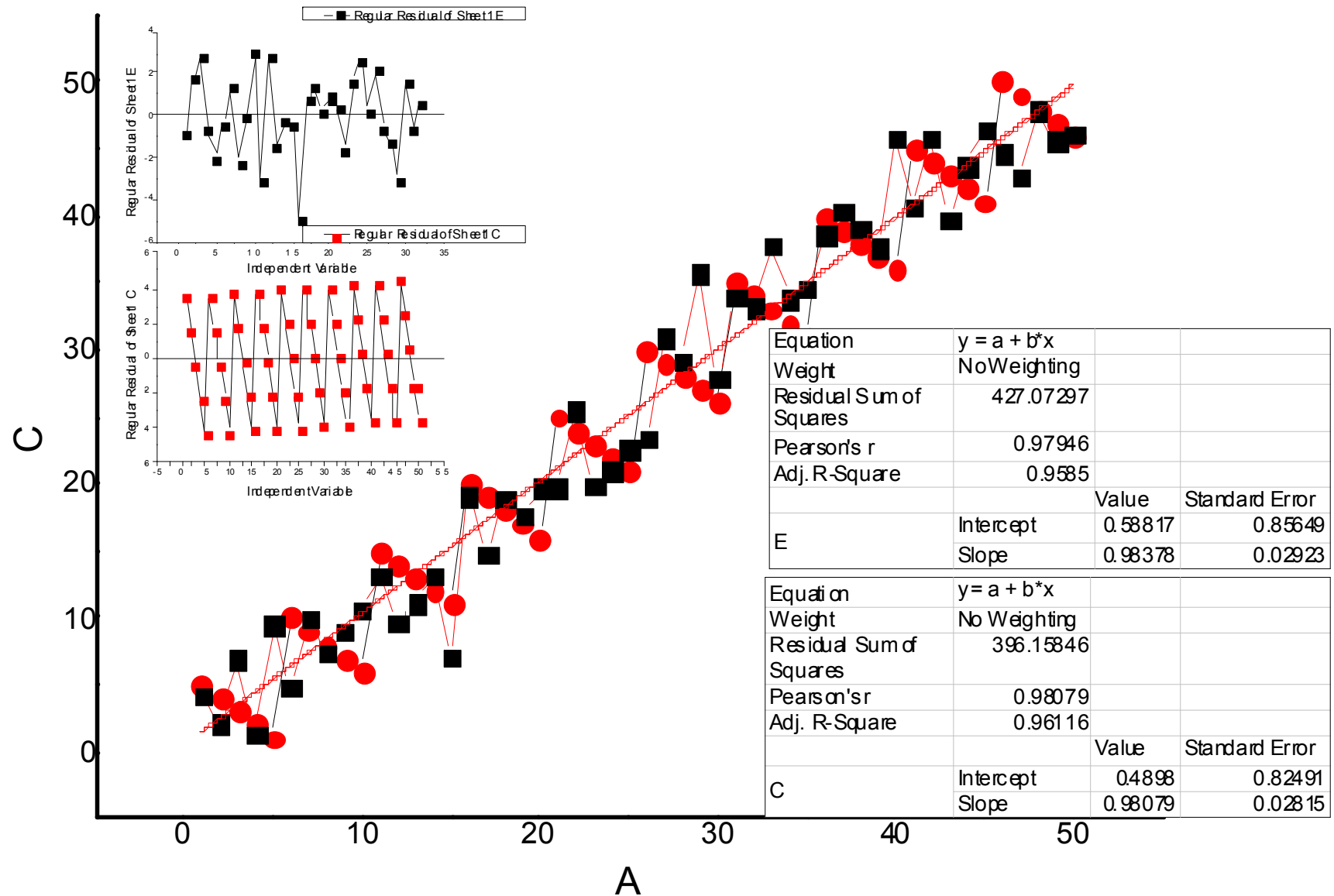


Fig. 5.9 The least-squares best-fit straight line to a sinusoidal variation. Error bars smaller than symbol size. **Health warning** It is possible to use the method of least squares to find the 'best-fit' straight line for *any* data set. This *does not* mean that a linear fit is an appropriate theoretical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

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 σ_{y_i} sean distintos $\Rightarrow$ se pondera cada dato con la incerteza correspondiente σ_{y_i} ,

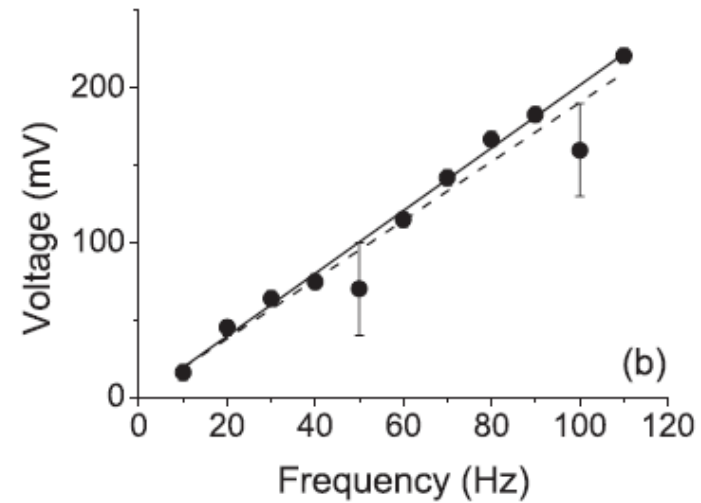
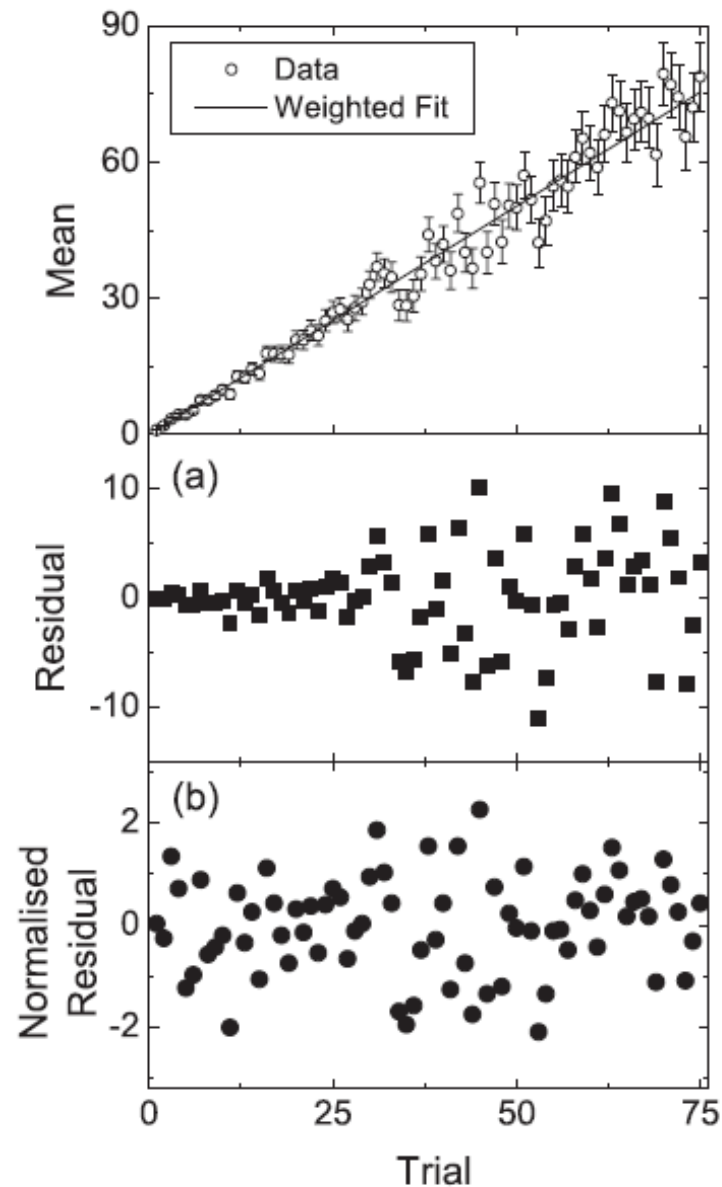
$$y = a_1 + a_2 x$$

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

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

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

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



Graph (b)

Unweighted

Weighted

$(1.9 \pm 0.2) \text{ mV/Hz}$

$(2.03 \pm 0.05) \text{ mV/Hz}$

$(0 \pm 1) \times 10 \text{ mV}$

$(-1 \pm 3) \text{ mV}$

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

DATOS CORRELACIONADOS

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

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

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

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

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

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 $s_{xy} = 0$.

Ejemplo:

Medimos I y V para calcular $R=V/I$ y $W=V.I$

-Si la fuente de corriente, el amperímetro y el voltímetro son de buena calidad no hay correlación entre las fluctuaciones y $s_{IV}=0$.

$$s_R^2 = \frac{1}{I^2} s_V^2 + \left(\frac{V}{I^2} \right)^2 s_I^2 + 0, \quad s_W^2 = I^2 s_V^2 + V^2 s_I^2$$

$$\frac{s_R^2}{R^2} = \frac{s_V^2}{V^2} + \frac{s_I^2}{I^2}$$

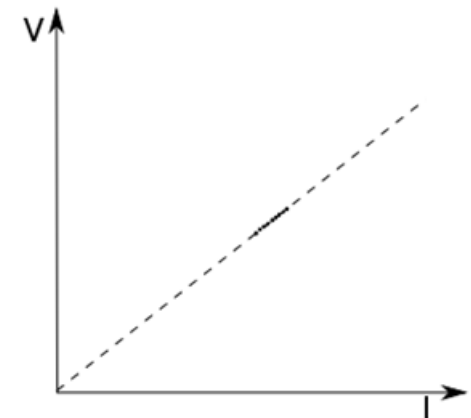
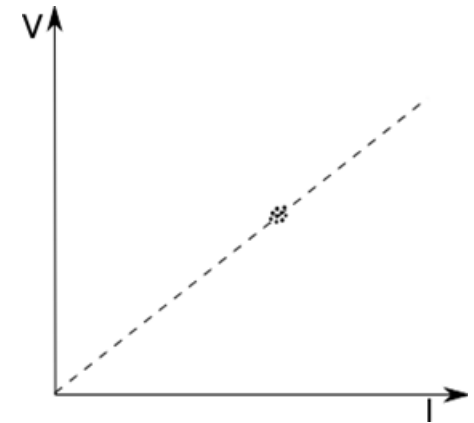
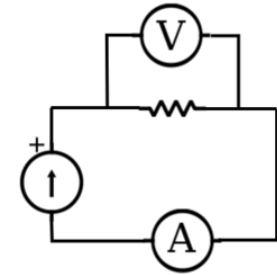
-Si la fuente es muy inestable, el amperímetro y el voltímetro medirán valores **perfectamente** correlacionados

$$V_i - \bar{V} = R(I_i - \bar{I}) \Rightarrow s_V^2 = R^2 s_I^2$$

$$s_{IV} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (V_i - \bar{V})(I_i - \bar{I}) = R s_I^2$$

$$s_R^2 = \frac{1}{I^2} s_V^2 + \left(\frac{V}{I^2} \right)^2 s_I^2 + 2 \frac{1}{I} \left(-\frac{V}{I^2} \right) s_{IV} = 0$$

$$s_W^2 = I^2 R^2 s_I^2 + V^2 s_I^2 + 2VI s_{IV} = 4WR s_I^2$$



La incerteza en R será “pequeña” aún cuando s_I sea “grande”

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:

0) Ver si hay forma de **linealizar**. Por ej. $y = \frac{A}{1+Bx} \rightarrow \frac{1}{y} = \frac{1}{A} + \frac{B}{A}x$

1) 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).

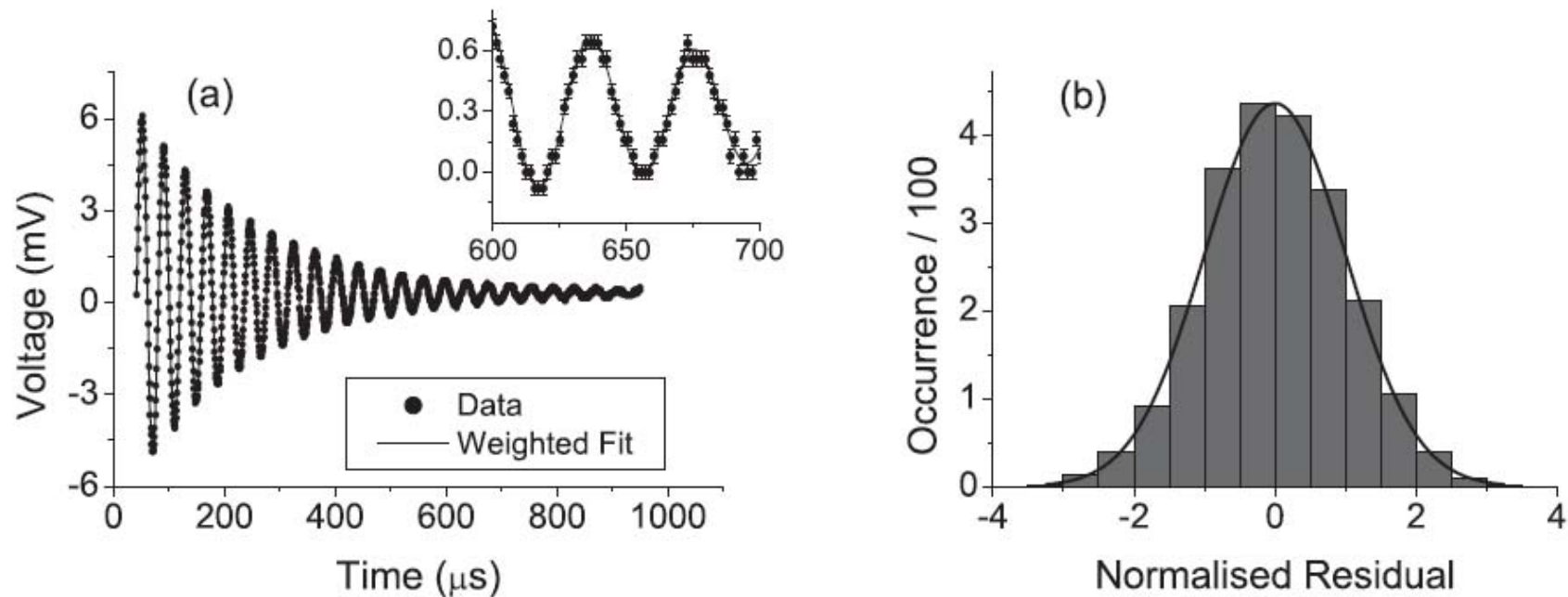
2) Dado un conjunto $(a_1, a_2, \dots, a_N)$ calcular los residuos normalizados para cada x_i, y_i

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

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

4) 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



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

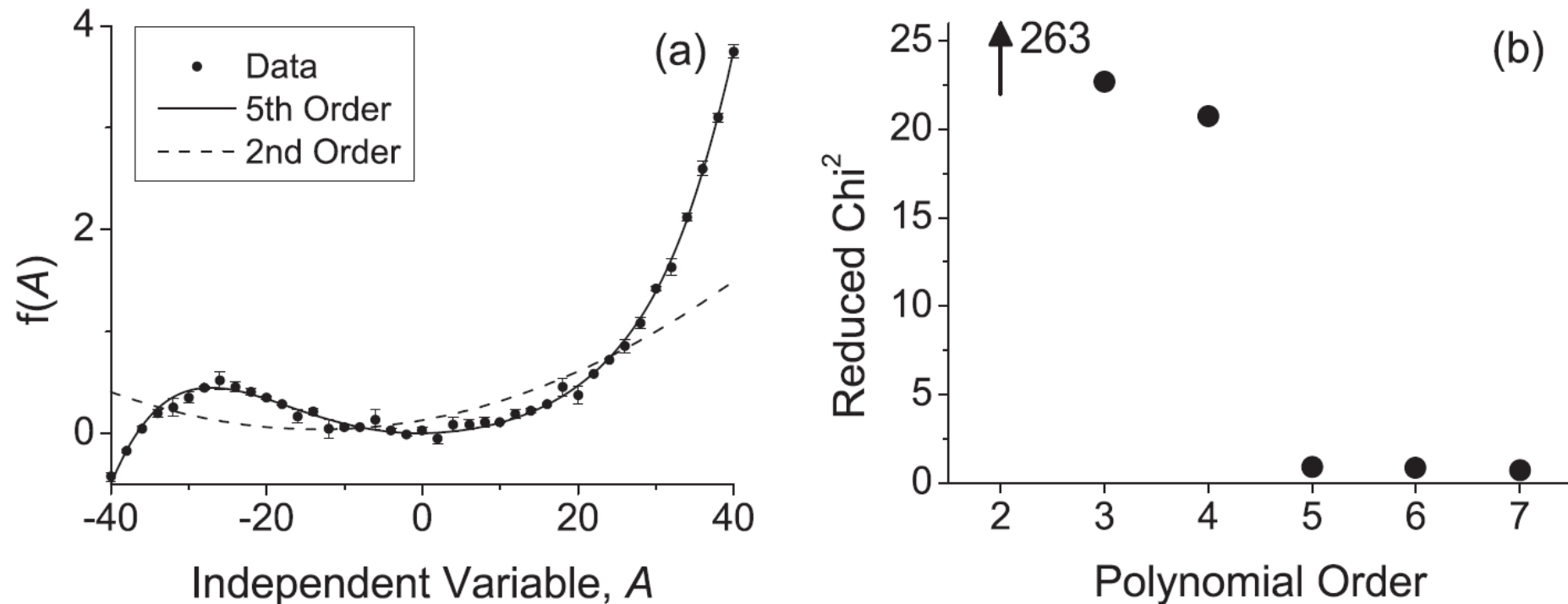
¿Qué valores estimativos para los parámetros iniciales utilizaríamos?

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

Navaja de Occam

Evitar la sobreparametrización del modelo de ajuste de datos



OJO con los polinomios de orden N "grande" si queremos **EXTRAPOLAR** datos

For every complex problem there is an answer that is clear, simple, neat, plausible, and ... WRONG.
Henry-Louis Mencken

Métodos numéricos para encontrar el mínimo de χ^2

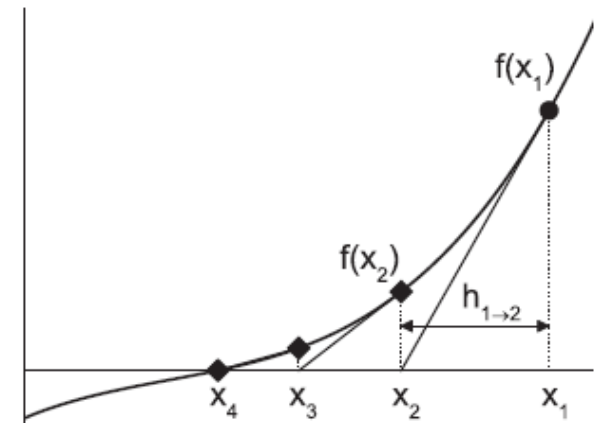
Todas las técnicas son **iterativas** y proponen algún algoritmo que va convergiendo al conjunto $a_1, a_2, \dots, a_N$ que minimiza χ^2 .

1) Newton-Raphson (1D) (Resuelve $f(x)=0$).

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 $h = -f(x_2)/f'(x_2)$
y sigo hasta que $f(x_n) < \varepsilon$

-Converge rápido si x_1 está cercano a la solución

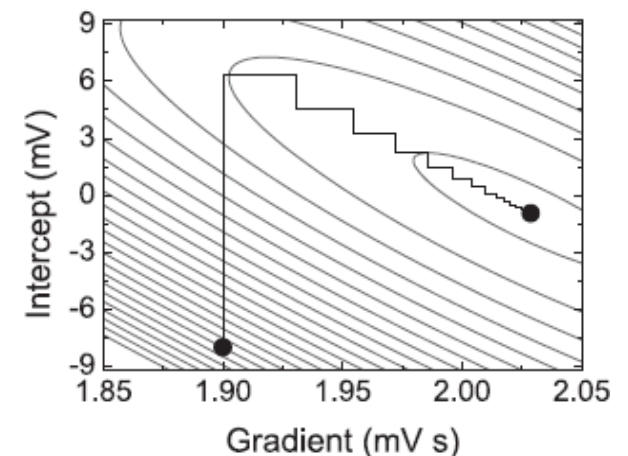


2) Grid Search

Para dos o más variables voy modificando de a una hasta encontrar un mínimo y paso a la siguiente.

-Es simple y depende poco de los parámetros iniciales

-Converge MUY lentamente si hay correlaciones.



3) Método de **máximo gradiente**

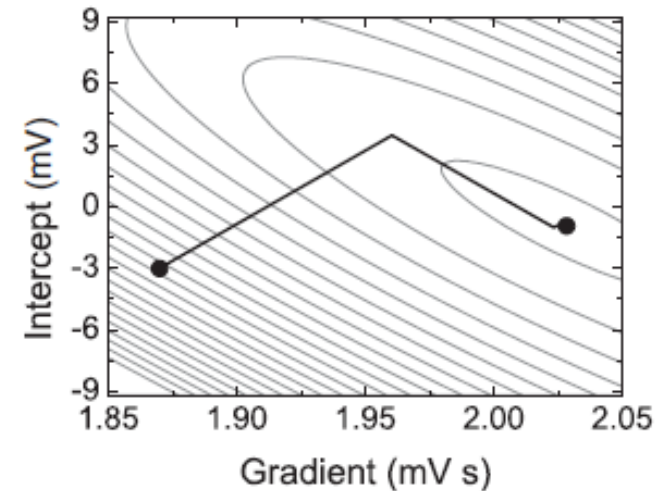
Se define la componente i del vector gradiente de χ^2 como

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

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

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

β es un factor de escala “convenientemente” elegido



- + Inicialmente converge muy rápido
- Cuando me acerco al χ^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:

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

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

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

Regla de iteración $\mathbf{a}_{s+1} = \mathbf{a}_s + \mathbf{h} = \mathbf{a}_s - H_s^{-1} \mathbf{g}_s$

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

5) Método de **Levenberg-Marquardt**

Combina 3) y 4) usando 3) para aproximarse rápidamente a la solución y 4) para obtener valores más refinados. Notar que las reglas de iteración son similares

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

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

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

5) Método de Levenberg-Marquardt

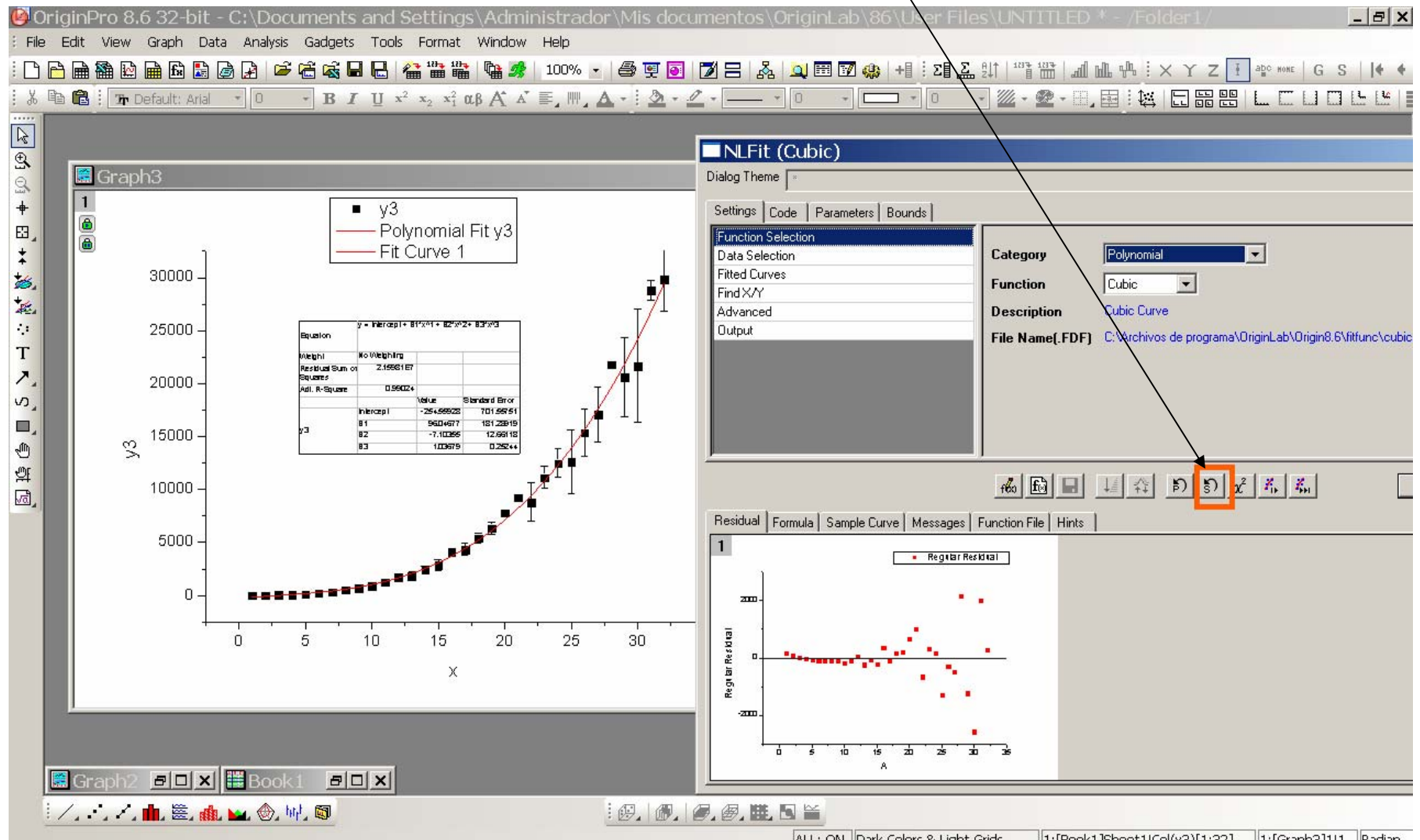
- 1) Elegir un valor inicial para $\mathbf{a}$, evaluar χ^2 , iniciar $\lambda \sim 10^{-3}$
- 2) Calcular $\mathbf{h}$ en base a $\overline{\mathbf{H}}$ y evaluar χ^2 en $\mathbf{a} + \mathbf{h}$
- 3) Si χ^2 aumentó, incrementar λ (típico x10) y volver a 2
- 4) Si χ^2 disminuyó, decrementar λ (típico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

6) Método Simplex

En los casos en que no tenemos mucha idea de los parámetros se puede hacer una primera aproximación con el método Simplex



6) Método **Simplex**

(Fitting Curves to Data The Simplex algorithm is the answer. M. Caceci and W.Cacheris, Byte p340, 1984)

Un Simplex es una figura geométrica que en M dimensiones tiene $M+1$ vértices (en 2D es un triángulo, en 3D un tetraedro)

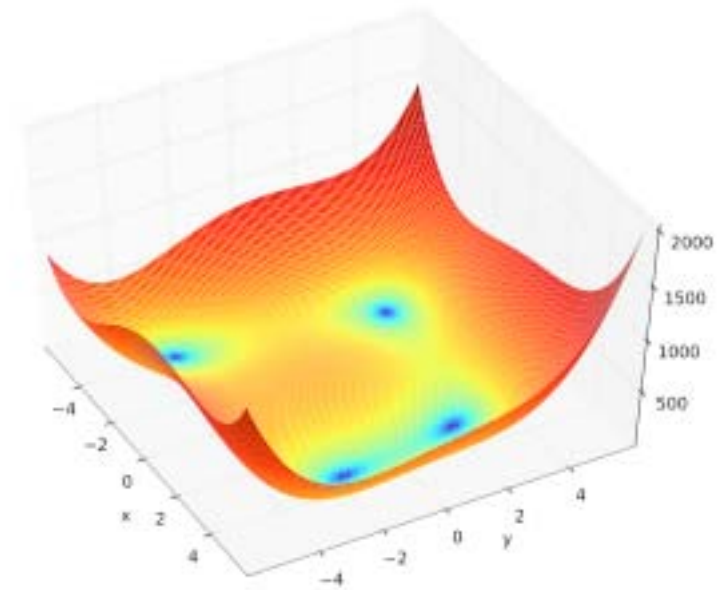
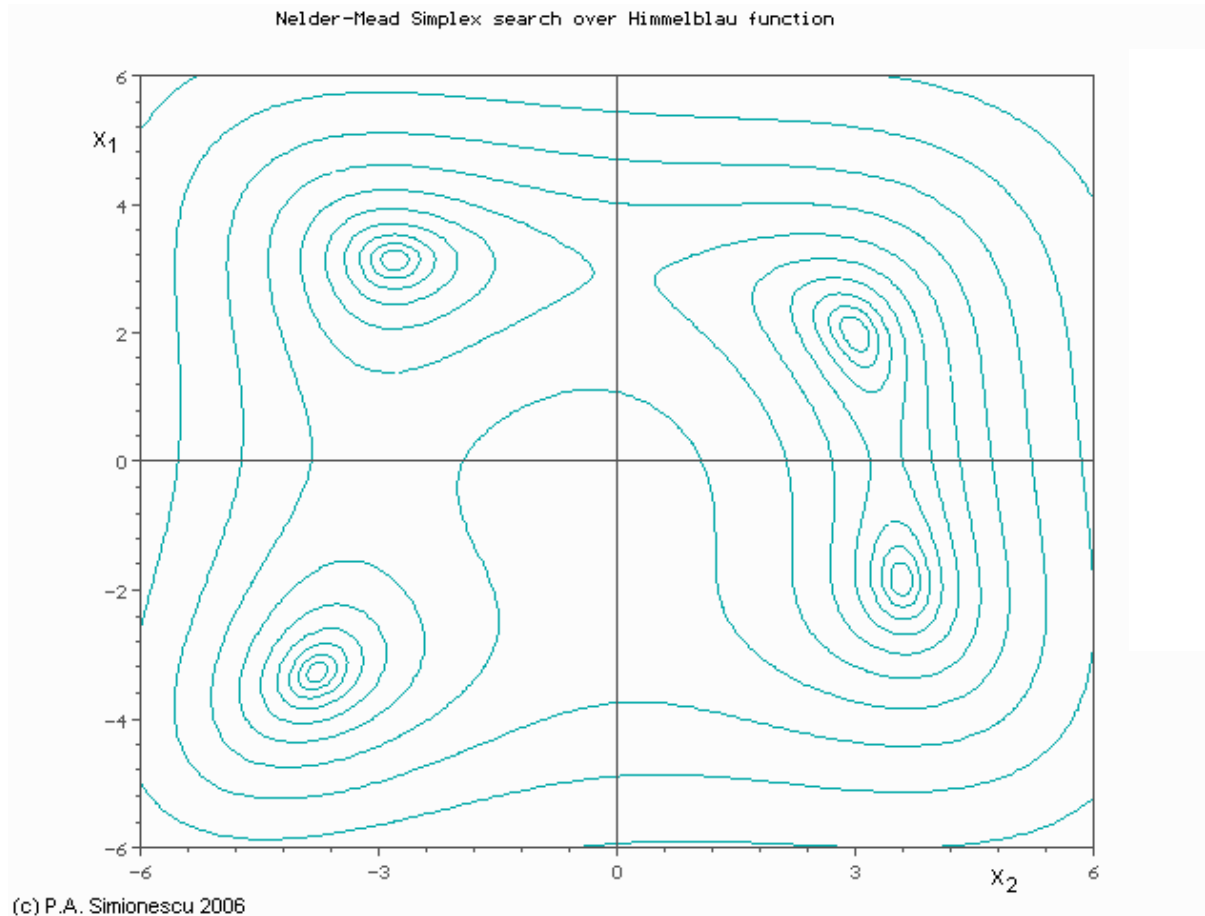
- 1) Empezar con un Simplex inicial ($\mathbf{a}$ inicial).
- 2) Evaluar χ^2 en cada vértice y elegir el vértice donde es mayor.
- 3) Reflejar este vértice en la cara opuesta y evaluar χ^2 y redefinir los vértices del Simplex.

A esto se le agregan tests para escalear el tamaño del Simplex con reglas de reflexión, expansión, contracción y reducción, hasta que converge a un mínimo en χ^2 .

Simplex

Función de Himmelblau

$$f(x,y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$$



Ventajas:- No diverge

- χ^2 se evalúa pocas veces en cada iteración
- No hace falta derivar numéricamente
- No hace falta invertir matrices

Estimación de la incerteza 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 incerteza 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.

Para el caso particular de una recta $y = mx + c$

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_i - y(x_i))^2}{\sigma_i^2}; \quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial c^2} = \sum_i \frac{1}{\sigma_i^2}; \quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial m^2} = \sum_i \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}; \quad \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial c \partial m} = \sum_i \frac{x_i}{\sigma_i^2}$$

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

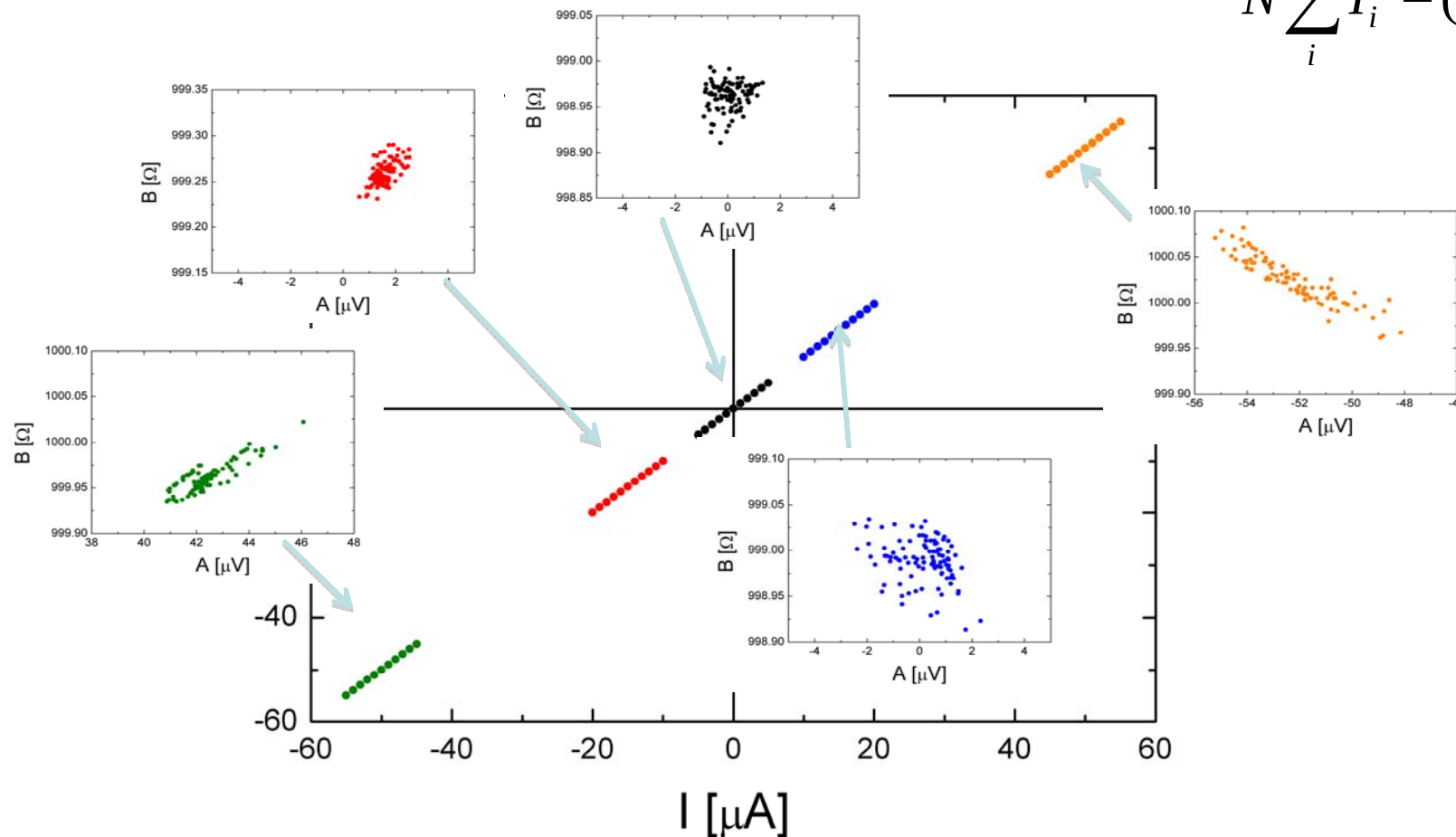
$$\sigma_c^2 = \frac{\sum_i \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}}{\Delta}; \quad \sigma_m^2 = \frac{\sum_i \frac{1}{\sigma_i^2}}{\Delta};$$

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

Ver que la correlación no necesariamente es igual a cero ya que $C_{12} = -\bar{x}/(\Delta \sigma^2)$

Como ejemplo, mido la curva I - V de una resistencia de $1\text{ k}\Omega$.
 Lo hago en distintos rangos de I y para cada rango lo hago 100 veces.
 Ajusto entonces 100 rectas para cada rango y grafico la
 Pendiente B vs la ordenada A

$$s_{IV} = -\frac{\bar{I}}{N \sum_i I_i^2 - (\sum_i I_i)^2} s_V^2$$



Hay una correlación como la que se espera. Negativa para $\bar{x} > 0$, positiva para $\bar{x} < 0$ y aparentemente nula para $\bar{x} = 0$.

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

- Con lo ya visto puedo determinar $\mathbf{a}$, $\sigma_{\mathbf{a}}$ y obtener un valor para $\chi^2_{\min}$.
- Definimos los grados de libertad como:
 $N_L = N_D - N_P$ (N° datos – N° parámetros)

- χ^2 es una variable aleatoria con f. distribución:

$$X(\chi^2, N_L) = \frac{(\chi^2)^{\frac{N_L}{2}-1} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{N_L}{2}} \Gamma\left(\frac{N_L}{2}\right)}$$

$X(\chi^2, N_L)$: valor medio N_L , media $\sim N_L - 2/3$, moda $\sim N_L - 2$

$\sigma_{\chi^2} = \sqrt{2N_L}$. Es aprox. Gaussiana para $N_L > 10$.

Defino también la probabilidad P de obtener un valor de χ^2 entre $\chi^2_{\min}$ e infinito como

$$P(\chi^2_{\min} \leq \chi \leq \infty, N_L) = \int_{\chi^2_{\min}}^{\infty} X(\chi^2, N_L) d\chi^2$$

Si hay buen acuerdo entre modelo y datos:

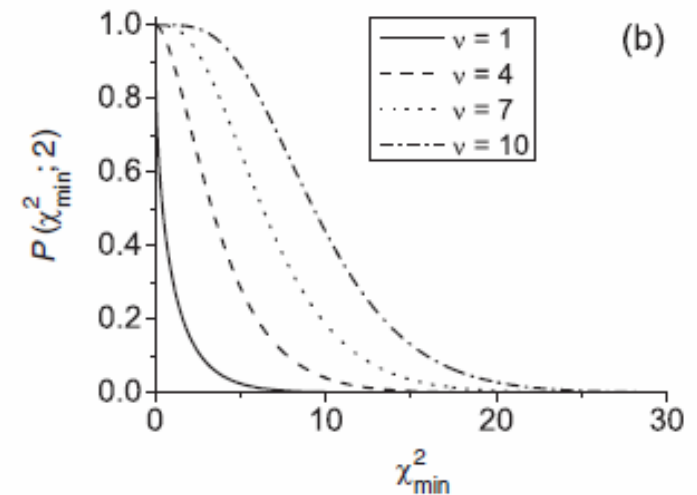
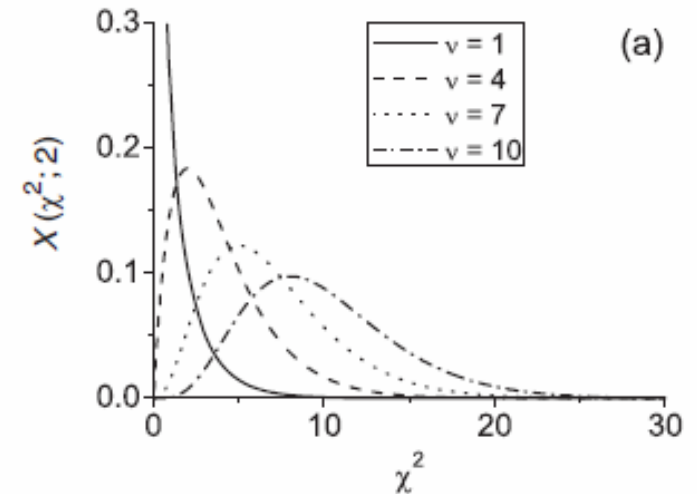
$\chi^2_{\min} \sim N_L$ (valor medio)

y por lo tanto:

$$P(\sim N_L \leq \chi \leq \infty, N_L) \sim 0.5$$

También se define χ^2 reducido o normalizado como:

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



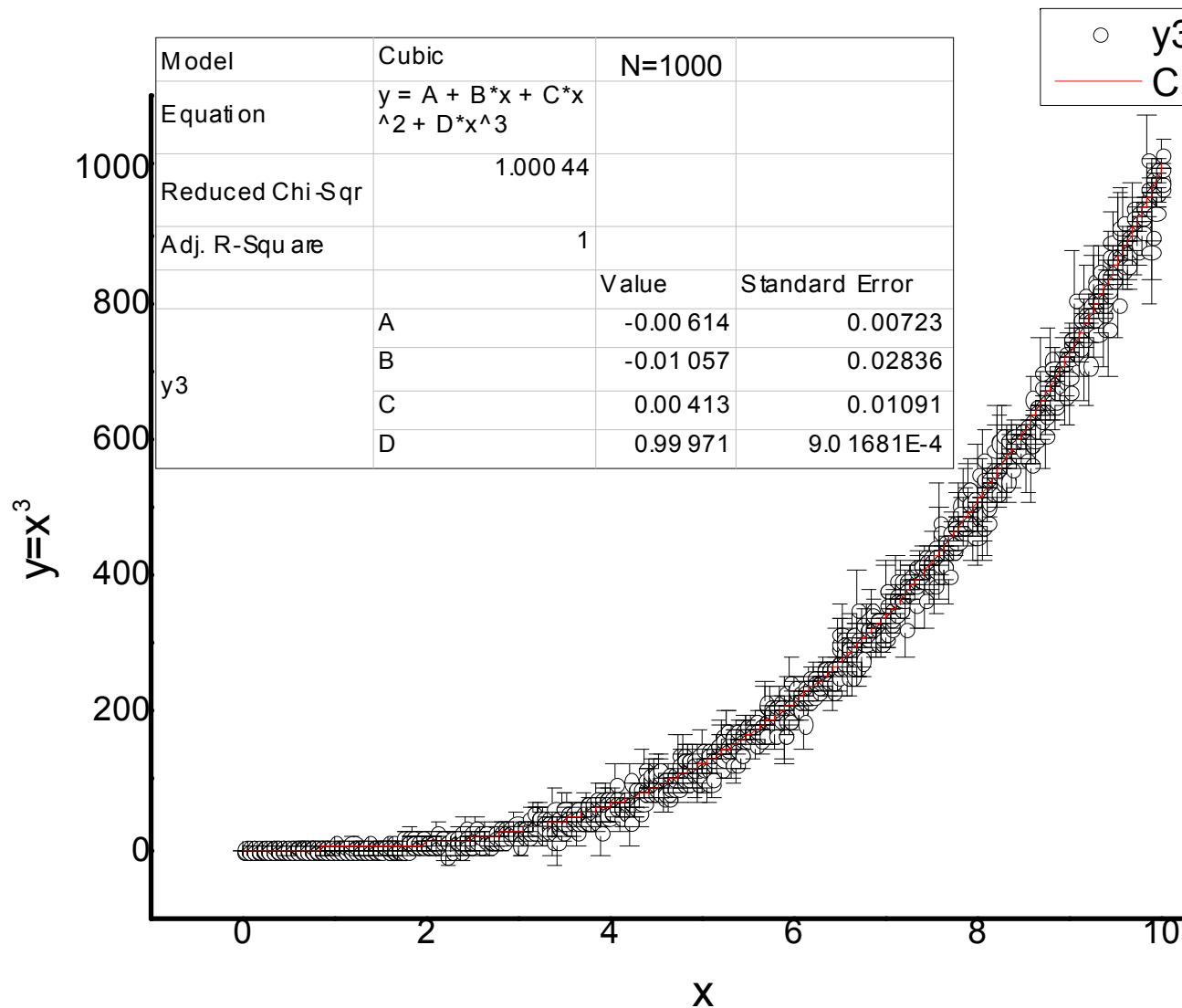
RESUMIENDO

- Para un ajuste razonable: $P(\chi^2_{\min}, N_L) \sim 0.5$
- Si $P(\chi^2_{\min}, N_L) \rightarrow 1$ chequear incertezas de datos
- El modelo NO SE RECHAZA $\chi^2_{\min}$ está dentro de 2σ (95%)
- $N_L - \text{Sqrt}(2N_L) < \chi^2_{\min} < N_L + \text{Sqrt}(2N_L)$
- El modelo se CUESTIONA si $P(\chi^2_{\min}, N_L) < 10^{-3}$ o > 0.5
- El modelo se RECHAZA si $P(\chi^2_{\min}, N_L) < 10^{-4}$

❖ $\chi^2_n \sim 1$ OK

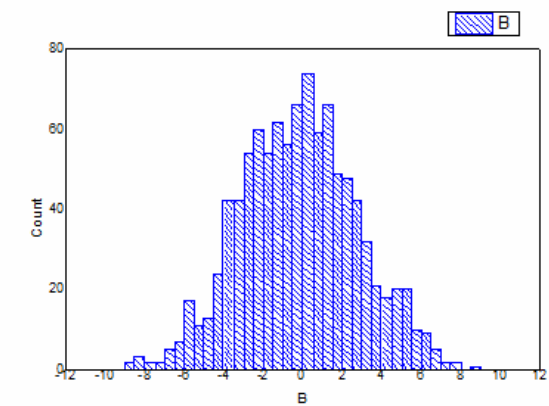
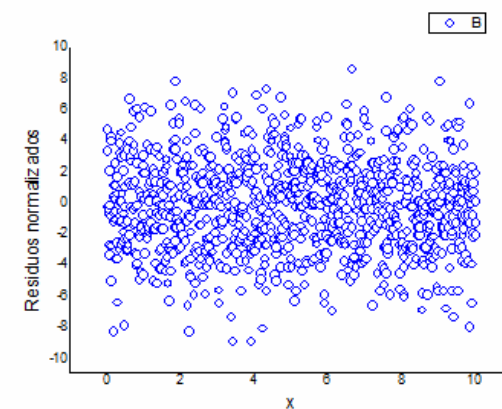
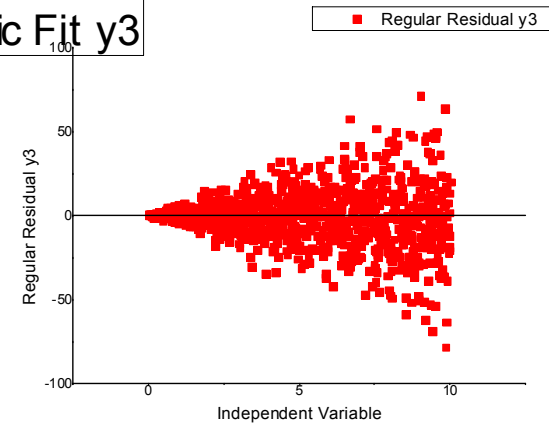
❖ $\chi^2_n \ll 1$ chequear incertezas de datos

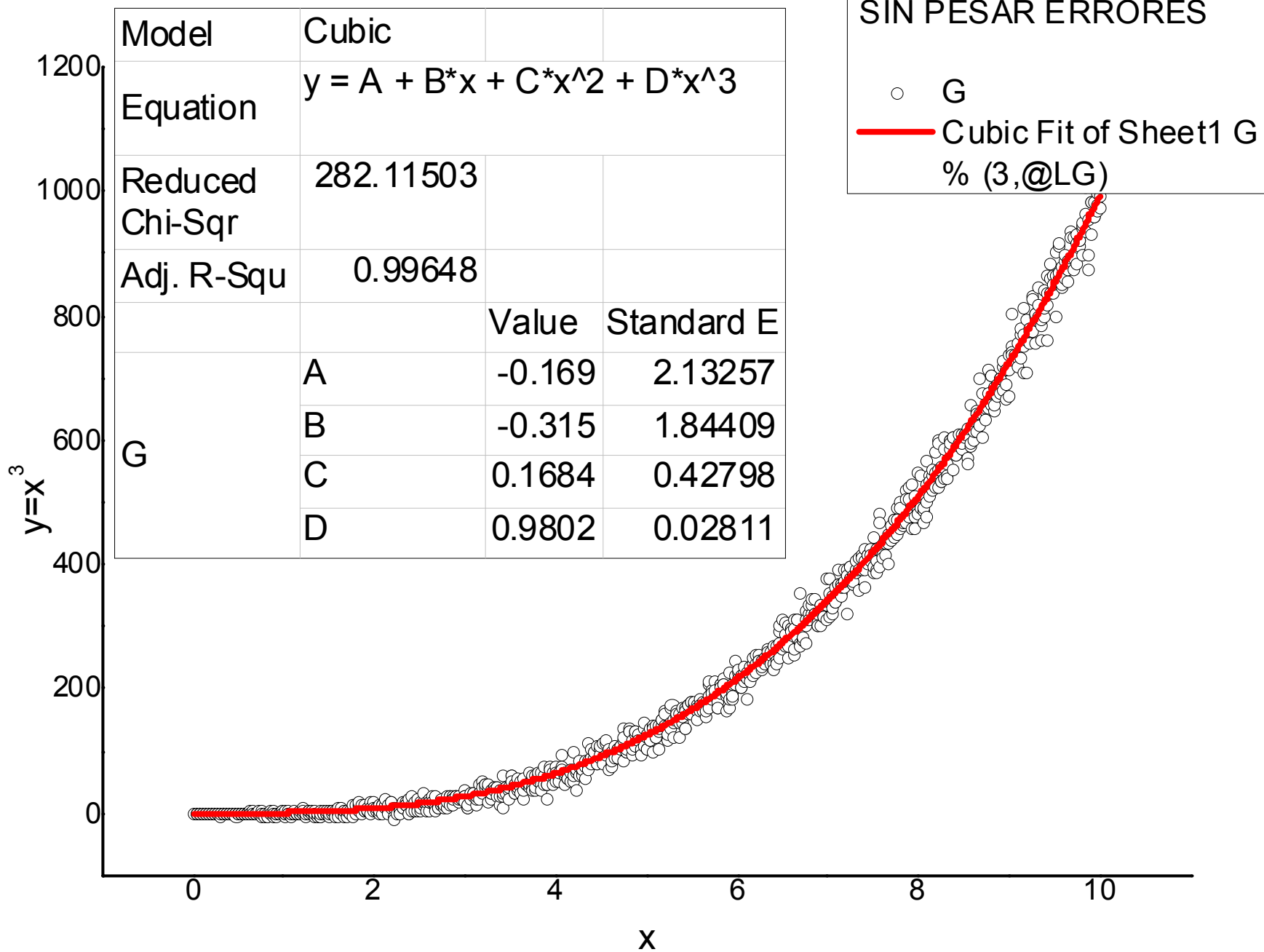
❖ $\chi^2_n > 1.5$ el modelo debe ser CUESTIONADO

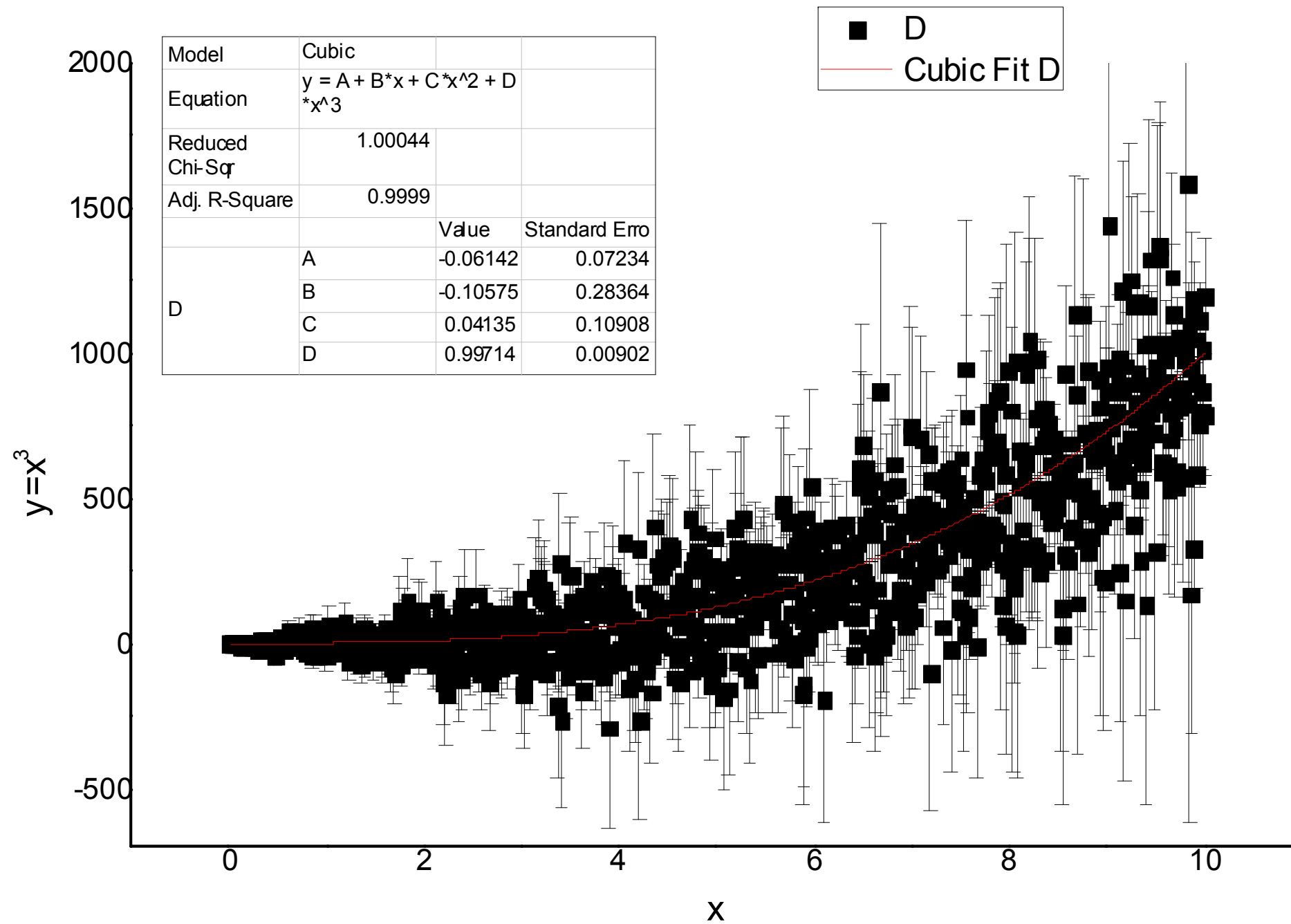


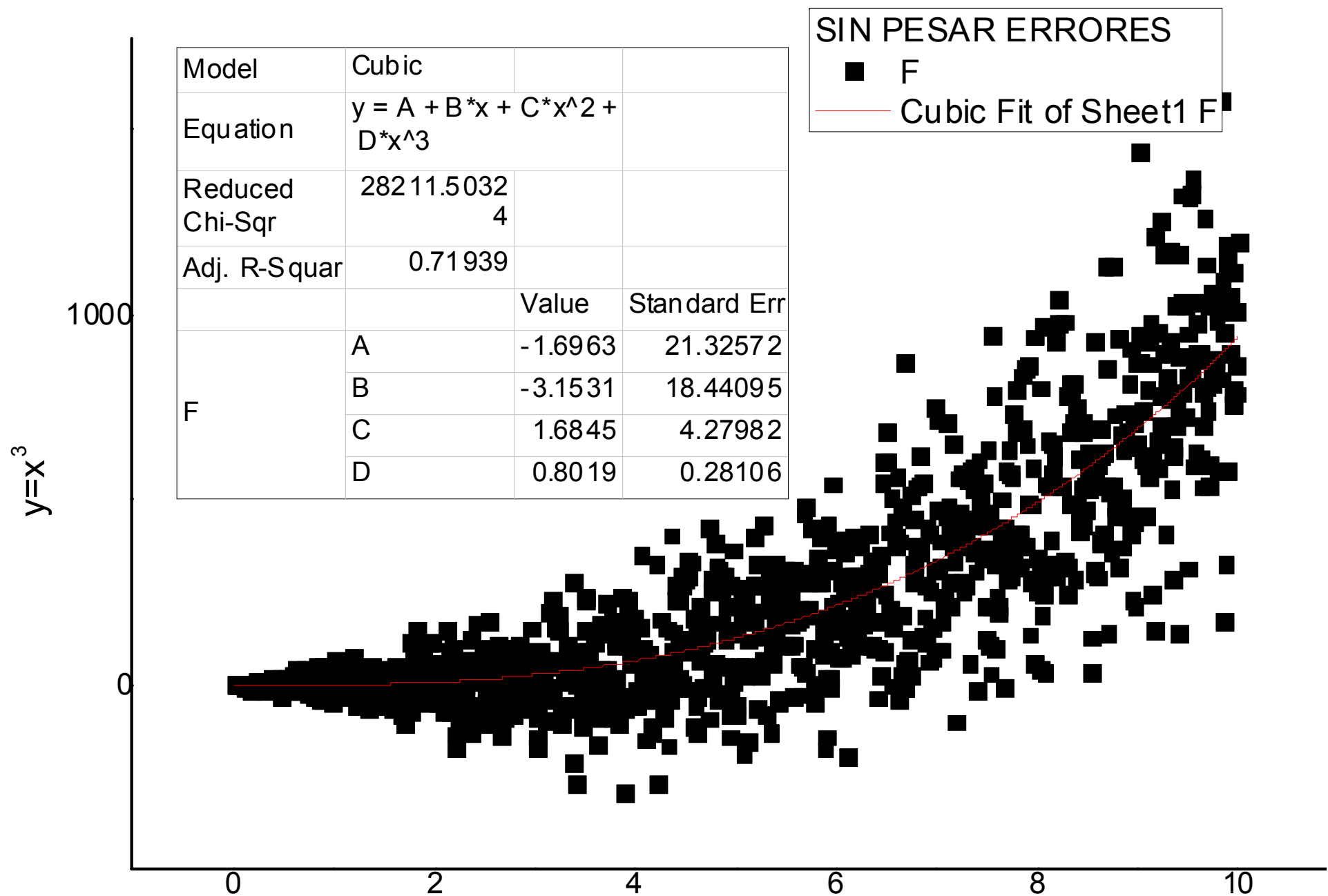
Model	Cubic	N=1000	
Equation	$y = A + B \cdot x + C \cdot x^2 + D \cdot x^3$		
Reduced Chi-Sqr	1.00044		
Adj. R-Square	1		
		Value	Standard Error
y3	A	-0.00614	0.00723
	B	-0.01057	0.02836
	C	0.00413	0.01091
	D	0.99971	9.01681E-4

○ y3
— Cubic Fit y3









MORALEJA: Usar CM ponderados si las incertezas son diferentes

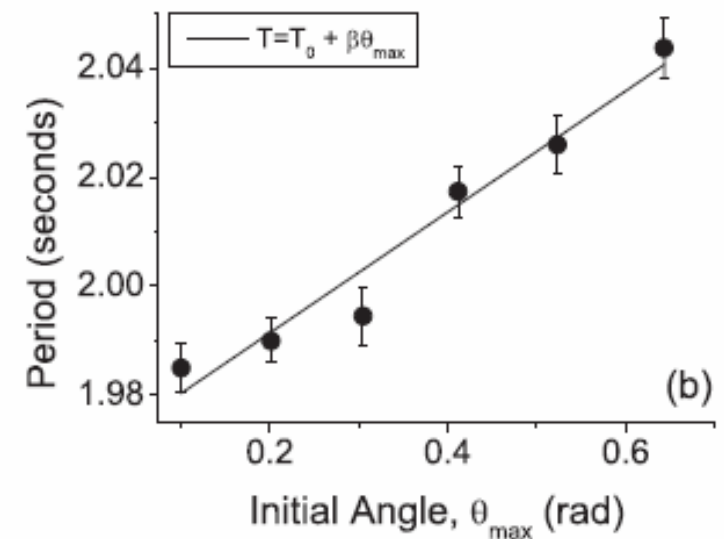
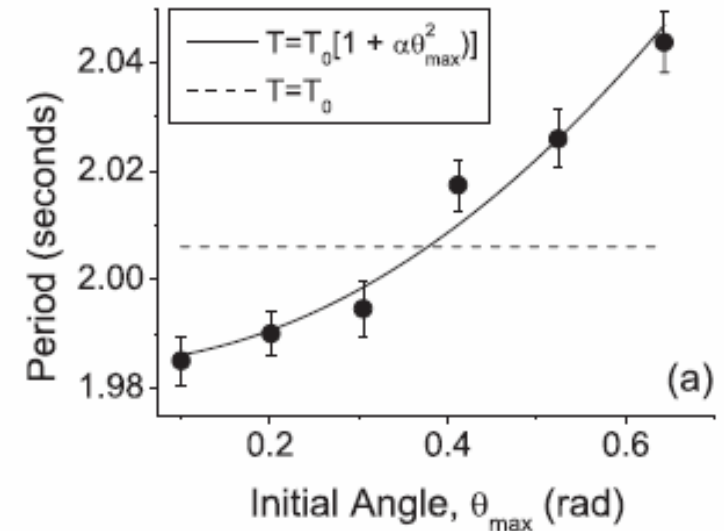
Ejemplo del período del péndulo

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

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	$\chi_{\min}^2$	χ_{ν}^2	$P(\chi_{\min}^2; \nu)$
$T = T_0$	5	107.2	21.4	1.6×10^{-21}
$T = T_0 [1 + \alpha \theta_{\max}^2]$	4	3.39	0.9	0.49
$T = T_0 [1 + \beta \theta_{\max}]$	4	4.39	1.1	0.36

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

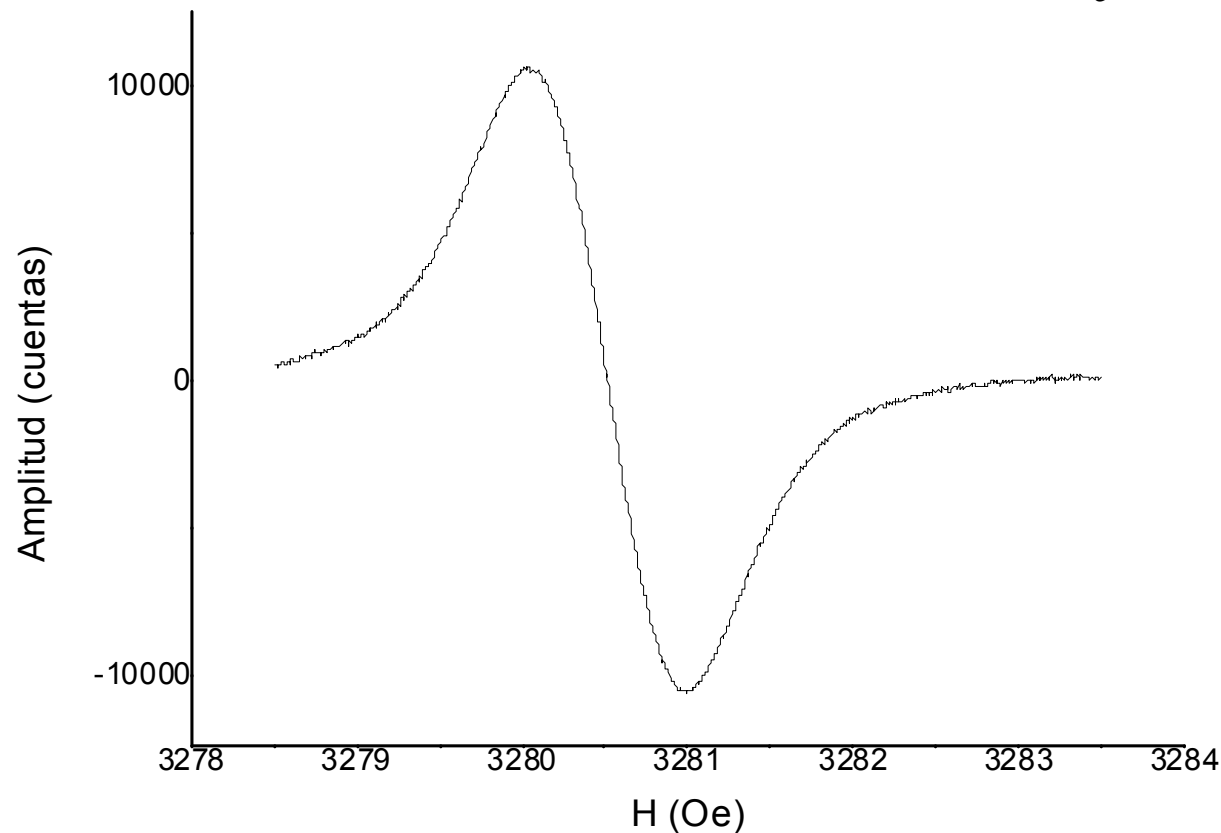


Otro ejemplo de la vida real

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

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

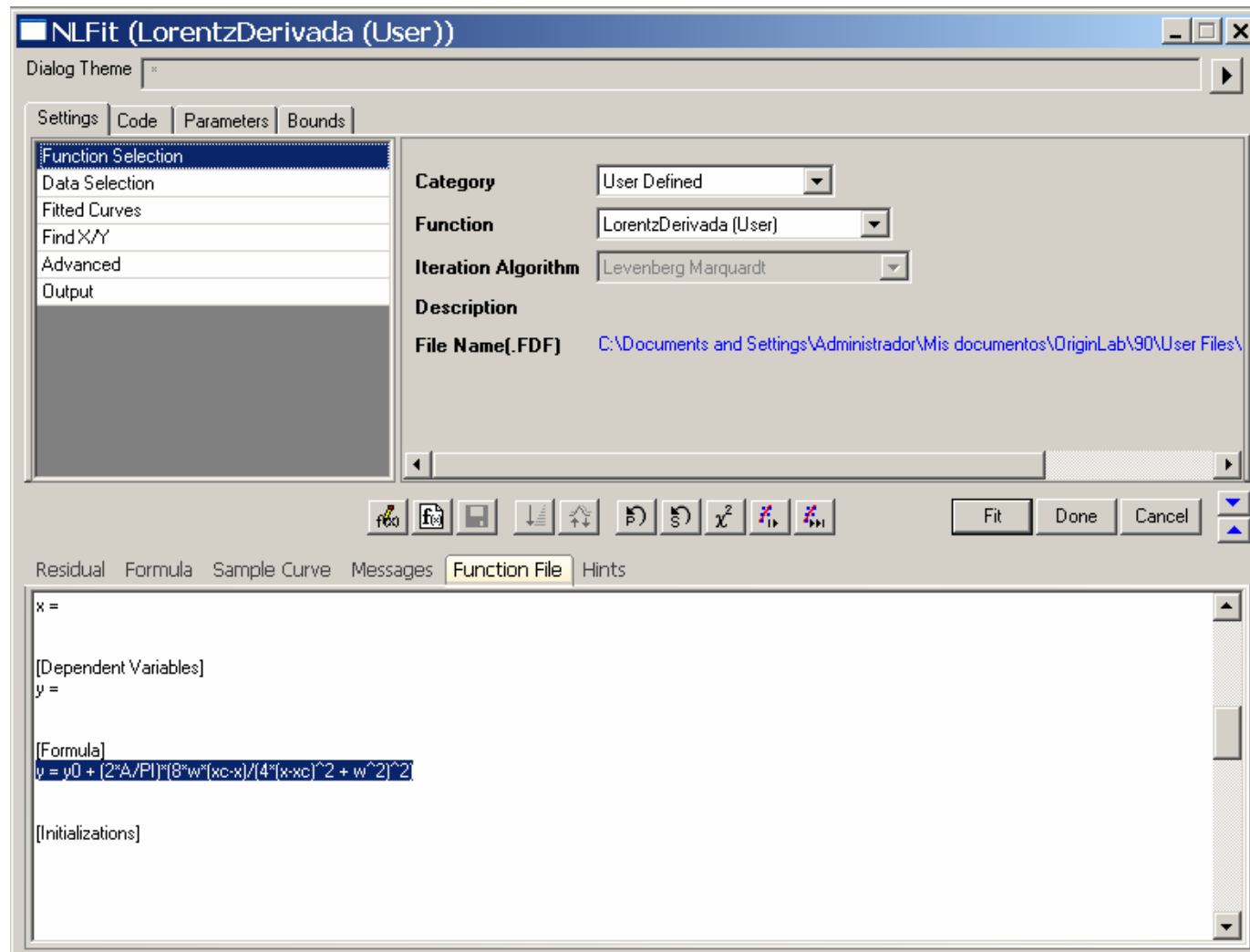
-Lorentziana? $f_L(x) = y_0 + A\frac{1}{4(x-x_c)^2 + \Delta x^2}$



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

$$y'_L = y_0 + (2*A/PI)*(8*w*(xc-x)/(4*(x-xc)^2 + w^2)^2)$$

$$y'_G = y_0 + (4*A/(w^3*sqrt(PI/2)))*(exp(-2*((x-xc)/w)^2)*(xc-x))$$



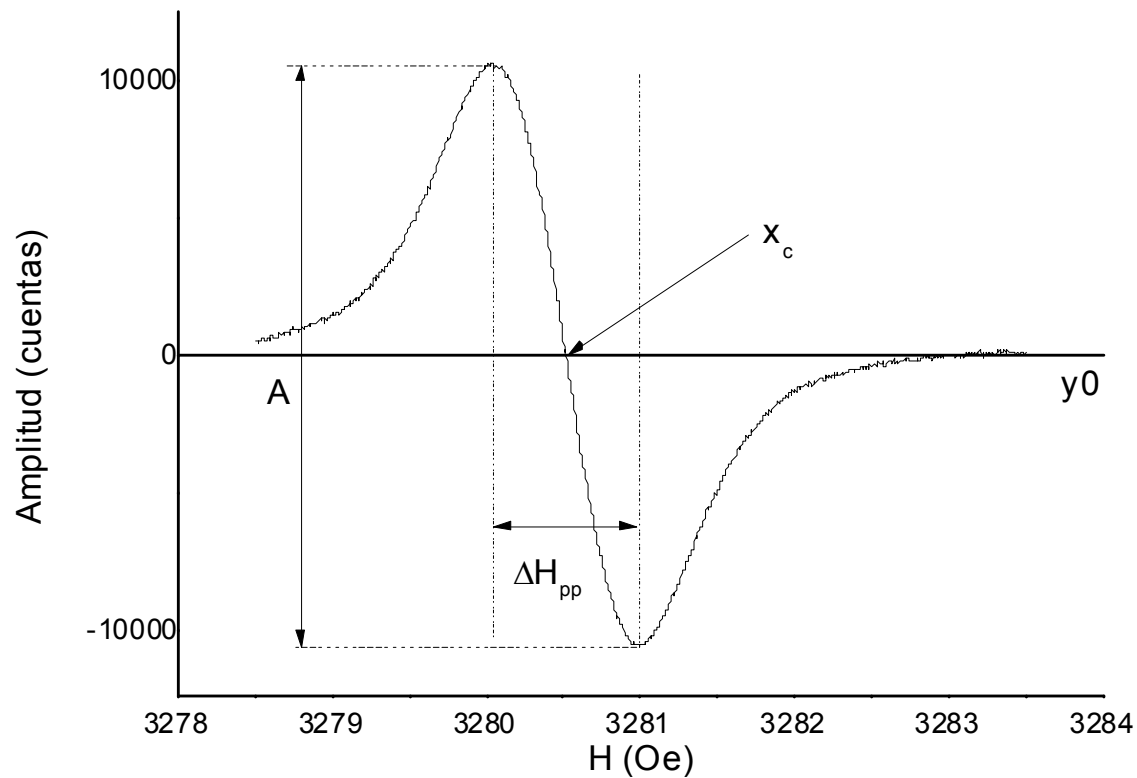
2) INICIALIZAR los parámetros lo mejor que se pueda.
En este ejemplo:

$x_c \sim 3280.5$

$w \sim 1$ (depende de la función!)

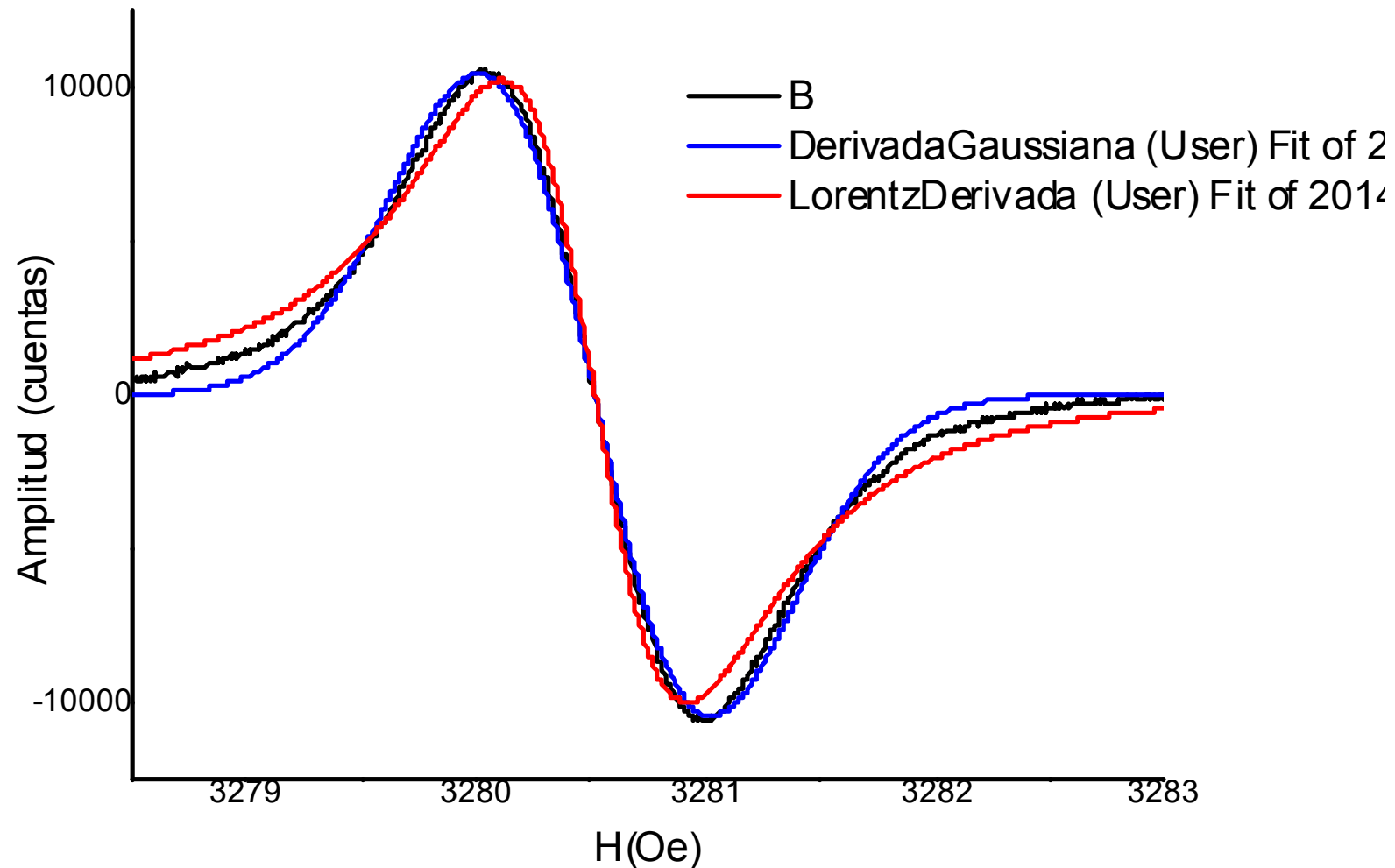
$y_0 \sim 0$

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

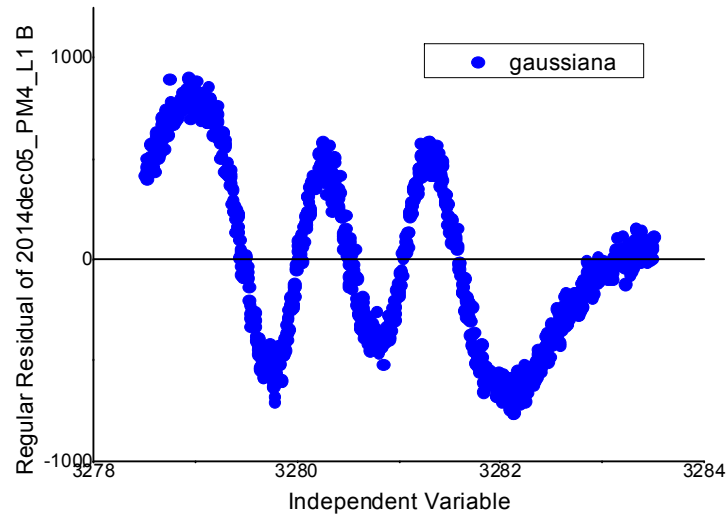


3) Ajustar.

- 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.

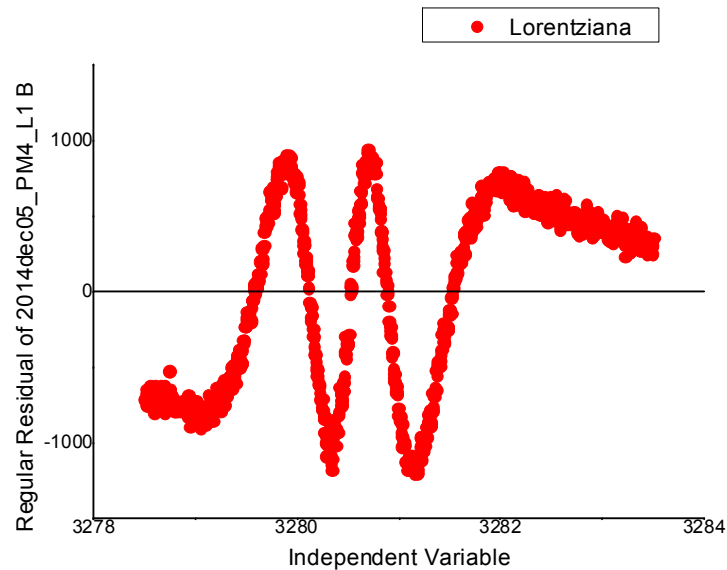


4) Analizar errores del ajuste y curva de residuos.



	Value	Standard Error
A	11134.00092	--
y0	-1.05575	13.7159
w	1.01391	0.00221
xc	3280.51453	--

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



	Value	Standard Error
y0	120.9348	87.64724
A	23905.93808	748086.4778
w	1.39556	0.00709
xc	3280.51392	513.19877

5) Conclusión

Ninguna de las dos funciones describe correctamente el espectro experimental.

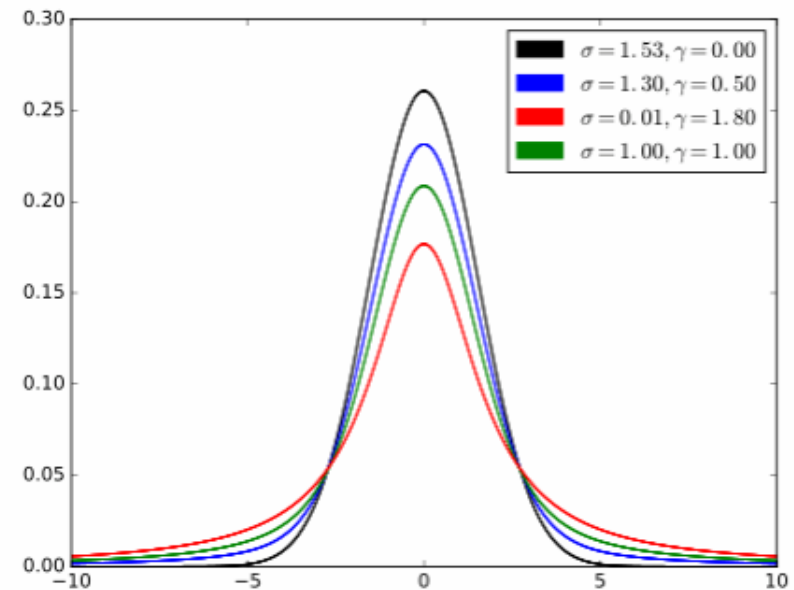
Si solo quiero x_c , w y A
 $\Rightarrow$ Gaussiana OK

Si necesito ajustar mejor puedo usar
Pseudo Voigt

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

(Centered) Voigt

Probability density function



Plot of the centered Voigt profile for four cases. Each case has a full width at half-maximum of very nearly 3.6. The black and red profiles are the limiting cases of the Gaussian ($\gamma = 0$) and the Lorentzian ($\sigma = 0$) profiles respectively.

