

Notas breves sobre graficación con *gnuplot*  
(Otro paréntesis en el curso de Programación y lenguaje  
Fortran.)

Carlos Calcáneo Roldán

8 de Abril de 2016

**Resumen**

En este escrito presentamos un brevísimo resumen de los comandos más elementales para graficar en el ambiente gnuplot.

# Interpretando experimentos a través de gráficas de datos.

## ¿Porqué graficamos datos?

Uno de los grandes éxitos de la ciencia es su capacidad predictiva, es decir, cuando describimos un fenómeno natural no sólo para entender su estado actual o pasado sino para poder decir en que situación se encontrará en el futuro o en otras condiciones. Las personas que nos dedicamos a hacer ciencia no sólo queremos maravillarnos de lo que observamos sino que nos exigimos *entender* lo que estamos viendo, lo cual asociamos, casi siempre, con nuestra capacidad para *predecir* la evolución de eso que nos maravilla.

Un paso importante para lograr esta predictibilidad es encontrar relaciones entre las variables que podemos medir en un experimento, el problema general es encontrar la relaciones:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}(\mathbf{x})$$

$$(y_1, y_2, y_3, \dots, y_m) = (y_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n), y_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n), y_3(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n), \dots, y_m(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n))$$

En general el problema es encontrar  $m$  relaciones entre  $n$  variables, pero no podemos empezar así, nos concentramos primero en una relación o un aspecto importante de lo que observamos, por ejemplo una relación sencilla entre las variables importantes de lo observado:

$$y = y(\mathbf{x}) = y(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

y, casi siempre, empezamos a describir nuestro entorno relacionando dos de las variables observadas solamente:

$$y = y(x)$$

Así, nuestro punto de partida es *suponer* que existe tal relación. En ocasiones es posible, incluso, proponer la forma explícita de esta relación (lineal, polinomial, exponencial, logarítmica, etc.).

Para empezar a reconocer estas relaciones entre variables, se vuelve indispensable graficar los valores que toman las variables  $x$ ,  $y$ , dadas una secuencia de  $N$  mediciones. Tendremos entonces un conjunto

$$\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \dots, (x_N, y_N)\}$$

de puntos (a los cuales reconocemos como *los datos de un experimento*) que podemos graficar.

Para graficar los datos de un experimento podemos recurrir a métodos manuales tradicionales o métodos computacionales más contemporáneos. Cuando se trata de graficar pocos datos, resulta conveniente (y es lo más económico en esfuerzo) usar el método manual en el cual usamos (de preferencia) papel milimétrico y graficamos con mucho cuidado los datos que queremos interpretar fácil introducir error involuntario al graficar de esta forma por lo que insistimos en que si se va a graficar así debemos cuidar al máximo la limpieza y el orden de la gráfica.

Cuando ya son muchos datos, el método manual puede resultar poco práctico o imposible de implementar. Por sí sólo, Fortran no puede producir gráficas de datos, sin embargo existen paquetes de graficación que nos permiten hacer este trabajo. Aquí nos concentramos en dos de ellos: gnuplot y Mathematica.

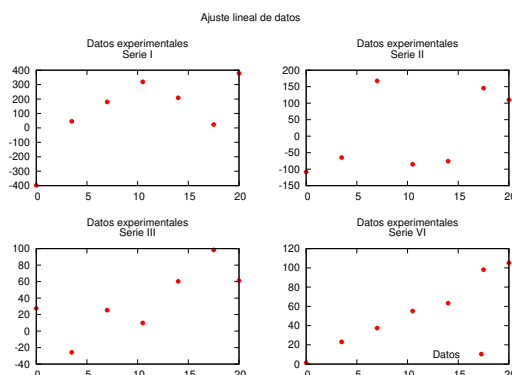


Figura 1: Ejemplo de como se deben ver las gráficas de los datos del archivo pocosdatos.dat

Ya graficados los datos, podemos *ajustar* una relación entre las variables. Lo cual nos permitirá predecir valores de la variable dependiente  $y$  para distintos valores de la variable independiente  $x$ , lo cual corresponde a la predictibilidad de la que hablábamos inicialmente.

## Graficando con gnuplot

Antes de iniciar debemos recalcar que no pretendemos reproducir aquí el manual de gnuplot, sino dar los elementos que te permitan iniciar con la graficación. Para mayor ayuda te recomendamos que consultes el manual de este paquete disponible en el área de cómputo o bien:

<http://www.fnal.gov/docs/products/gnuplot/tutorial/>  
<http://www.gnuplot.info/>

Usaremos los datos contenidos en el archivo pocosdatos.dat para empezar a utilizar el programa, antes que nada explora el archivo y valora el formato que tienen los datos. Verás que son de la forma:

|                    |                  |                  |                  |                  |
|--------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| Datos consecutivos | serie de datos a | serie de datos b | serie de datos c | serie de datos d |
| :                  | :                | :                | :                | :                |

La interpretación de estos datos es que la primera columna, los datos consecutivos, representan la variable independiente que se midió a intervalos regulares, las demás columnas representan el valor de distintas variables dependientes que corresponden a cada valor de la variable independiente.

Podemos graficar estos datos, como son pocos, con el método manual. En la Figura 1 hacemos 4 graficas que corresponden a cada una de las variables.

Veamos como hacer esta graficación con **gnuplot** paso a paso, en cada uno de los cuales recalcaremos en **azul** los comandos específicos necesarios. Antes de escribir comandos en gnuplot lo llamamos en una terminal usando el comando gnuplot.

```
calcano@gallifrey:$ gnuplot
```

con esto entramos al ambiente de gnuplot y debe verse en la pantalla lo siguiente:

```

GNU PLOT
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot>

```

## A) Archivos

Para graficar un archivo (en estos ejemplos vamos a usar el archivo pocosdatos.dat) usamos el comando `plot` (para gráficas de dos dimensiones)

```

GNU PLOT
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot>

```

después se abre una ventana en la que se despliega la gráfica. gnuplot asume que las primeras dos columnas en el archivo van a graficarse, la primera como la variable independiente y la segunda como la variable dependiente. Recordemos que nuestros archivos tienen 5 columnas de datos, la primera corresponde a la variable independiente y debemos graficar, separadamente, las otras columnas como función de ésta.

Podemos escoger las columnas con la opción `u` ( “*using*” o “*usando*”) de gnuplot. El ejemplo siguiente producirá las 4 gráficas que queremos, una después de la otra; respectivamente: la primera columna *vs* la segunda, la tercera, la cuarta y la quinta:

```

GNU PLOT
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot>

```

Observemos que los puntos están graficados como pequeñas cruces, para graficar con puntos en su lugar usamos la opción `pt` ( “*point type*” o “*tipo de punto*”) de la siguiente forma:

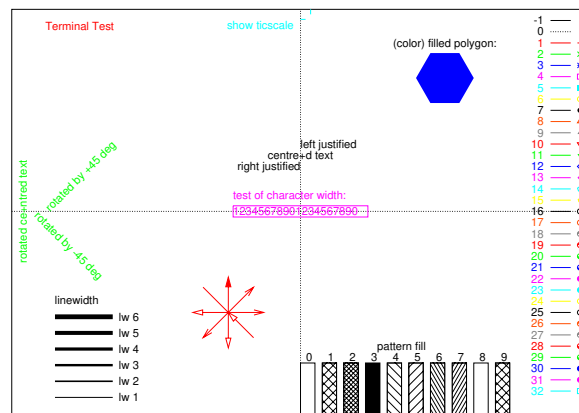


Figura 2: La pantalla de información que sale del comando de gnuplot test, en el extremo derecho podemos ver los tipos de puntos.

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot>

```

Así como pt también existe la opción lt ( “*line type*” o “*tipo de linea*”), ambos controlados por un número, si ejecutamos el comando `test` podremos ver cuales son los diferentes tipos de puntos y líneas que podemos usar, en el extremo derecho de la pantalla de graficación (ver la Figura 2).

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> test
gnuplot>

```

Observemos que en el extremo superior derecho de la gráfica se coloca una clave (en inglés “*key*”) de designación de los datos y el símbolo que se escribe para representarlos. Podemos controlar la posición de la clave o incluso que no aparezca.

La siguiente secuencia de comandos coloca la clave, respectivamente, arriba a la izquierda, arriba a la derecha, abajo a la izquierda, abajo a la derecha y la desaparece.

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> test
gnuplot> set key left top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key left bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> unset key
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot>

```

De manera automática se coloca en la clave el archivo en el cual están los datos, podemos modificar el contenido de la clave con la opción title (“*título*”). En el siguiente ejemplo ponemos la clave abajo a la derecha y con el título “Datos”.

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> test
gnuplot> set key left top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key left bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> unset key
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot>

```

Para agregar un título global a la gráfica usamos el comando `set title` (“*fijar título*”) y luego el título entre comillas. En el ejemplo siguiente fijamos el título global a la gráfica “Series de datos experimentales”

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> test
gnuplot> set key left top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key left bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> unset key
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Series de\ndatos experimentales"
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot>

```

Introducimos el cambio de línea en el título con el comando `\n`, lo cual es una forma muy común para introducir un cambio de línea, en muchos lenguajes de programación.

También podemos empalmar varias series de datos en una misma gráfica. En el ejemplo siguiente empalmamos todos los datos del archivo asignando diferentes títulos a cada serie. Podemos combinar tipo de puntos y colores:

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> test
gnuplot> set key left top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key left bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> unset key
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Series de\ndatos experimentales"
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos 1", "pocosdatos.dat" u 1:3 pt 4 title
"Datos 2", "pocosdatos.dat" u 1:4 pt 6 title "Datos 3", "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 9 title "Dat
os 4"
gnuplot>

```

Notemos que ya no fue necesario fijar el título global ni la colocación de la clave. Para remover ambos podemos usar los comandos `unset key` y `unset title`.

Para producir una copia impresa de nuestra gráfica debemos usar los comandos `set terminal` (“fijar terminal”) y `set output` (“fijar salida”) para producir un archivo ps, que después podemos imprimir o usar en documentos (por ejemplo de L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X.)

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "pocosdatos.dat"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> test
gnuplot> set key left top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right top
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key left bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> unset key
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Series de ndatos experimentales"
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos 1", "pocosdatos.dat" u 1:3 pt 4 title
"Datos 2", "pocosdatos.dat" u 1:4 pt 6 title "Datos 3", "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 9 title "Dat
os 4"
gnuplot> set terminal postscript eps enhanced color solid "Arial" 14
gnuplot> set output "datos.ps"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos 1", "pocosdatos.dat" u 1:3 pt 4 title
"Datos 2", "pocosdatos.dat" u 1:4 pt 6 title "Datos 3", "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 9 title "Dat
os 4"
gnuplot> set output
gnuplot> set terminal pop
gnuplot>

```

El ejemplo anterior produce la gráfica en el archivo *datos.ps* (ver Figura 3). Los últimos dos comandos: `set output` y `set terminal pop` cierran el archivo para imprimir y nos regresan a la terminal original, en pantalla, respectivamente.

## B) Funciones

También usamos el comando `plot` para graficar funciones (si se trata de funciones de una variable). En el siguiente ejemplo producimos la gráfica de la recta  $y = 2x + 10$

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 2*x + 10
gnuplot>

```



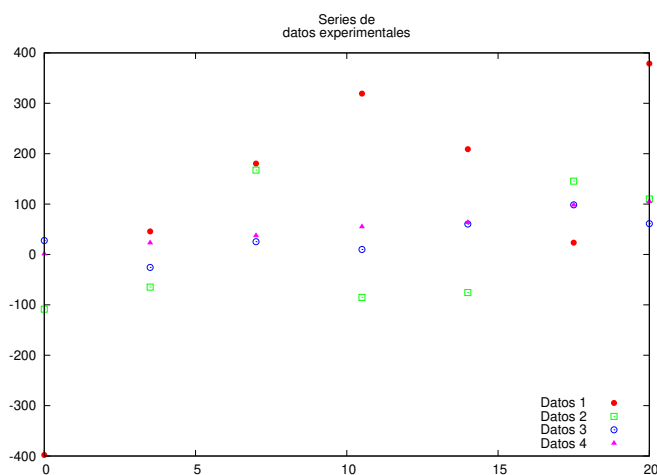


Figura 3: Gráfica con todas las series de datos empalmadas como se prepara en el texto.

Notemos que no es necesario escribir la ecuación de la recta completa, gnuplot asume que la variable independiente es igual a lo que escribimos inmediatamente después del comando `plot`.

La secuencia de comandos para el título y la colocación de la clave son iguales que en la graficación de datos de archivo por lo que ya no revisaremos estos pasos. Con la siguiente secuencia de comandos generamos las curvas  $y_1 = 2x + 10$ ,  $y_2 = 2x^2 + 10$  y  $y_3 = 2x^3 + 10$  en una sola gráfica.

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot 2*x + 10
gnuplot> set encoding iso_8859_1
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> set title "Graficaci\u00f3n de \ncurvas"
gnuplot> plot 2*x+10 title "recta", 2*x**2+10 title "cuadr\u00e1tica", 2*x**3+10 title
"c\u00fabica"
gnuplot>

```

Para los acentos de los títulos de las gráficas usamos el comando `set encoding iso_8859_1` y los códigos especiales:

|            | á    | é    | í    | ó    | ú    | ü    | ñ    |
|------------|------|------|------|------|------|------|------|
| minúsculas | \341 | \351 | \355 | \363 | \372 | \374 | \361 |
| mayúsculas | \301 | \311 | \315 | \323 | \332 | \334 | \321 |

### C) Datos con curvas

De la misma forma que podemos mezclar varias series de datos o bien varias curvas en una sola gráfica podemos empalmar datos de un archivo y curvas. En el ejemplo

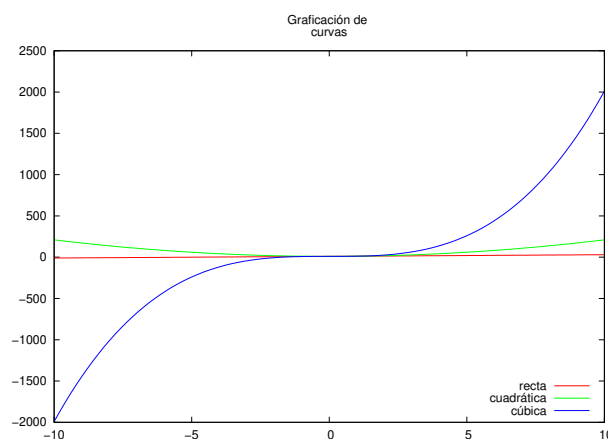


Figura 4: Gráfica de varias curvas empalmadas, como se prepara en el texto.

siguiente graficamos, de la manera que lo hemos venido haciendo, una serie de datos del archivo pocosdatos.dat y la recta  $y = 5x + 8$  (ver Figura 5). Notemos las opciones para poner los datos en rojo (*pt 7*) y la curva en negro (*lt 7*).

```

GNU PLOT
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> set title "Datos\ny\ncurvas"
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 7 title "Datos", 5*x+8 lt 7 title "Recta"
gnuplot>

```

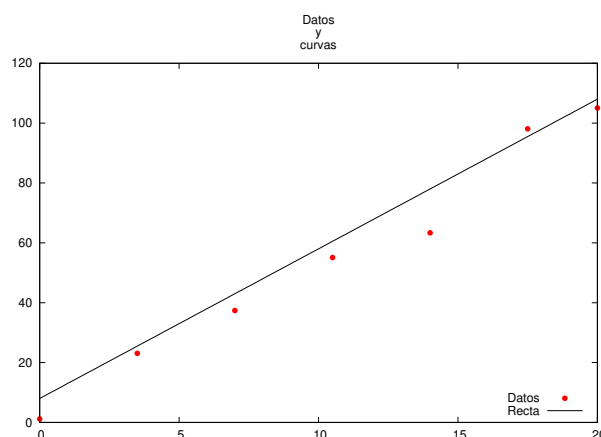


Figura 5: Gráfica de datos y una curva empalmados, como se prepara en el texto.

## D) Múltiples gráficas

Recordemos que nuestro objetivo es reproducir la Figura 1. Ahí no se han empalmado las series de datos en una gráfica, se construyó una gráfica múltiple: diferentes gráficas, cada una con una serie de datos y ocupando el mismo espacio que las gráficas originales.

Para lograr esto usamos el comando `set multiplot` (“*fixar gráfica multiple*”) que nos permite acomodar varias gráficas en la misma región que antes ocupaba una sola. Las opciones `layout ver, hor` (“*acomodo, ver, hor*”) distribuye *ver* gráficas en la dirección vertical y *hor* gráficas en la dirección horizontal, mientras que la opción `title` (“*título*”) le da un título global a la gráfica múltiple. La siguiente secuencia produce la gráfica de la figura 1.

```
GNUPLLOT
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> set multiplot layout 2, 2 title "Ajuste lineal de datos"
gnuplot> unset key
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie I"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie II"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie III"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie VI"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 7 title "Datos"
gnuplot> unset multiplot
gnuplot>
```

Cuando necesitamos estar produciendo muchas veces una misma gráfica (porque los datos van a estar cambiando o porque vamos a probar con diferentes curvas) es más conveniente poner todos los comandos en un archivo y sólo hacer pequeños cambios a éste. A los archivos que usamos así les llamamos comúnmente archivos de macros. En este ejemplo ponemos los macros en el archivo `pocosdatos.plt` y los usamos con el comando `load`.

```
#
# Este es un script(macro) de gnuplot
# se usa para generar graficas de manera automatica.
#
# La linea inmediata inferior nos dice que sera un "multiplot",
#es decir, varias graficas acomodadas en la hoja.
set multiplot layout 2, 2 title "Ajuste lineal de datos"
#
# El siguiente renglon elimina la clave.
unset key
#
#Grafica 1:
set title "Datos experimentales\nSerie I"
plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
#
#Grafica 2:
set title "Datos experimentales\nSerie II"
plot "pocosdatos.dat" u 1:3 pt 7 title "Datos"
#
#Grafica 3:
set title "Datos experimentales\nSerie III"
plot "pocosdatos.dat" u 1:4 pt 7 title "Datos"
#
#Grafica 4:
set title "Datos experimentales\nSerie VI"
set key right bottom
plot "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 7 title "Datos"
#
#Regresando las cosas a normalidad
unset multiplot
#
#
#
```

Figura 6: Ejemplo de archivo de macros.

```

G N U P L O T
Version 4.2 patchlevel 4
last modified Sep 2008
System: Linux 2.6.28-11-generic

Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007, 2008
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

Type 'help' to access the on-line reference manual.
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/

Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> set multiplot layout 2, 2 title "Ajuste lineal de datos"
gnuplot> unset key
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie I"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:2 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie II"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:3 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie III"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:4 pt 7 title "Datos"
gnuplot> set key right bottom
gnuplot> set title "Datos experimentales\nSerie VI"
gnuplot> plot "pocosdatos.dat" u 1:5 pt 7 title "Datos"
gnuplot> unset multiplot
gnuplot> load "pocosdatos.plt"
gnuplot>

```

Trata de repetir estos pasos ahora con el archivo `datosparaajuste.dat` y reproduce las gráficas generadas.

## Graficando con Mathematica

\*\*\* Shhhhh! Spoilers! \*\*\*

## El método de mínimos cuadrados

Como ya hemos discutido, después de un experimento en el cual observamos un sistema obtenemos un conjunto de datos y buscamos un modelo para poder predecir el comportamiento del sistema. Esto se resume al decir que buscamos *la curva de mejor ajuste* de nuestros datos. El modelo puede escogerse de manera arbitraria (casi siempre empezamos por suponer que la relación entre las dos variables es lineal) o bien motivados por una teoría que suponemos describe el comportamiento del sistema y los valores de los datos (en ocasiones lo que buscamos es comprobar que los datos efectivamente siguen esta teoría).

Debido al error inherente en cualquier experimento (ningún aparato de medición tiene infinita precisión) es imposible que los modelos ajusten exactamente a los datos, por lo que cualquier método que desarrollemos para ajustar debe contener una forma de valorar si el modelo describe bien a los datos observados o *la bondad* del ajuste.

Buscamos una relación entre la variable independiente  $x$  y la variable dependiente  $y$  que contenga parámetros los cuales se puedan variar para mejorar el ajuste:

$$y(x) = y(x; g(a_1, a_2, a_3, \dots, a_M))$$

donde  $(a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)$  representan los *parámetros del ajuste*. En general la dependencia en los parámetros puede ser tan complicada como sea necesario.

Estudiemos en este trabajo el caso en el cual la relación entre las variables presupone una cantidad  $M$  de parámetros que intervienen de manera lineal en el ajuste:

$$y(x) = y(x; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)$$

de tal manera que tenemos un gran número de modelos a los cuales podemos decir que siguen los datos, entre los cuales podemos mencionar:

a) Polinomiales:

$$\begin{array}{ll} y(x) = a_1 & \text{relación constante – independiente de la variable } x. \\ y(x) = a_1 + a_2x & \text{relación lineal.} \\ y(x) = a_1 + a_2x + a_3x^2 & \text{relación cuadrática.} \\ \vdots & \end{array}$$

b) Exponenciales:

$$y(x) = a_1 e^{a_2 x}$$

c) Logarítmicos:

$$y(x) = a_1 \text{Log}(a_2 x)$$

notemos que en todos estos casos los parámetros  $(a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)$  participan de manera lineal en el modelo.

Para determinar si tenemos un buen ajuste existen varias opciones, una de las más socorridas es el llamado “*ajuste por mínimos cuadrados*” el cual consiste en minimizar la

suma del cuadrado de las diferencias entre el valor de la variable dependiente que resulta del modelo,  $y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)$ , con su valor medido,  $y_i$ :

$$\sum_{i=1}^N [y_i - y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)]^2$$

La justificación cotidiana para usar esta cantidad es que nos interesa sumar la contribución, en cada punto medido, a la diferencia entre el modelo y el valor medido, lo cual reconocemos como *el error* del modelo. Si éste describe adecuadamente a los puntos, entonces la suma anterior debe ser pequeña.

Existe una manera más formal de justificar el método de ajuste por mínimos cuadrados. Consideremos la probabilidad de haber obtenido el conjunto de datos dado el modelo que hemos construido, a esta probabilidad se le conoce como *la verosimilitud de los parámetros*, y es en una cantidad que podemos calcular.

Al efectuar cada medición de la variable dependiente,  $y_i$ , cometemos un error. Si suponemos que la probabilidad de que la variable tome el valor predicho por el modelo,  $y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)$ , sigue una distribución normal y que cada medición es independiente de todas las otras, entonces podemos escribir la probabilidad del conjunto de datos, la verosimilitud de los datos, como el producto de las probabilidades de obtener cada uno de ellos:

$$P \propto \prod_{i=1}^N \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y_i - y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)}{\sigma} \right)^2 \right] \Delta y \right\} \quad (1)$$

En la ecuación (1) hemos supuesto que las desviaciones de todas las mediciones,  $\sigma$ , son iguales y que cada valor medido,  $y_i$ , está contenido en un intervalo constante  $\Delta y$ .

Notemos que  $P$  puede identificarse como una función de los parámetros del ajuste.

$$P = P(a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)$$

El mejor modelo corresponderá al que tenga máxima  $P$ , es decir *máxima verosimilitud*.

En lugar de la expresión (1), resulta más conveniente trabajar con el logaritmo de la verosimilitud:

$$L \propto - \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)}{2\sigma} \right]^2 + N \ln \Delta y$$

así, maximizar la verosimilitud es equivalente a minimizar

$$L \propto \sum_{i=1}^N \left[ \frac{y_i - y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)}{2\sigma} \right]^2 - N \ln \Delta y \quad (2)$$

ya que las cantidades  $\sigma$ ,  $N$  y  $\Delta y$  son constantes, minimizar la cantidad en (2) es equivalente a minimizar:

$$\sum_{i=1}^N [y_i - y(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_M)]^2$$

Así, el método de ajuste por mínimos cuadrados corresponde a un ajuste por máxima verosimilitud con los errores de medición tomados como independientes y con desviaciones,  $\sigma$ , constantes en cada uno de ellos.

Hasta aquí dejaremos la discusión general sobre ajuste usando esta metodología, para mayores detalles sobre el tema recomendamos consultar:

1. ‘‘Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing’’. William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling. Cambridge University Press (1992).
2. ‘‘Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences’’. Philip Bevington, D. Keith Robinson. McGraw-Hill Science/Engineering/Math (2002).
3. ‘‘An Introduction to Error Analysis: The Study of Uncertainties in Physical Measurements’’. John R. Taylor. University Science Books (1996).

Procedamos a calcular el ajuste a un modelo lineal, usando la metodología presentada, es decir, asumimos el modelo

$$y(x) = y(x; a, b) = a + bx \quad (3)$$

Lo que tenemos es un conjunto de mediciones de la variable dependiente,  $y_i$ , para distintos valores de la variable independiente,  $x_i$ , y el error cometido en cada una de esas mediciones  $\sigma_i$  que deseamos ajustar a un modelo lineal.

Partimos de la construcción de la función a minimizar:

$$\chi^2(a, b) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i} \right)^2 \quad (4)$$

es importante recordar que al usar esta función para encontrar los parámetros del modelo estamos asumiendo que los errores en la medición se distribuyen de manera normal (para una discusión más extensa sugerimos consultar las referencias del recuadro anterior).

Buscamos el mínimo de la función en (4) para encontrar los parámetros del modelo, en este mínimo las derivadas con respecto a los parámetros se hacen cero:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \chi^2}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i^2} \\ 0 &= \frac{\partial \chi^2}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{x_i(y_i - a - bx_i)}{\sigma_i^2} \end{aligned} \quad (5)$$

Notemos que la relación (4) es función de los parámetros  $a$  y  $b$ ; por ello la búsqueda del mínimo nos lleva a dos ecuaciones en estas variables. Si definimos las siguientes sumas:

$$\begin{aligned} S &\equiv \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} & S_x &\equiv \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2} & S_y &\equiv \sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2} \\ S_{xx} &\equiv \sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} & S_{xy} &\equiv \sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \end{aligned} \quad (6)$$

podemos escribir las condiciones (5) como:

$$\begin{aligned}aS + bS_x &= S_y \\aS_x + bS_{xx} &= S_{xy}\end{aligned}$$

por lo que los parámetros de mejor ajuste son:

$$\begin{aligned}a &= \frac{S_x S_{xy} - S_y S_{xx}}{S_x^2 - S S_{xx}} \\b &= \frac{S_x S_y - S S_{xy}}{S_x^2 - S S_{xx}}\end{aligned}$$

Ya con este resultado podríamos escribir el modelo completamente, pero es importante dar una valoración del ajuste que hemos encontrado. Frecuentemente sucederá que no conocemos con precisión el error particular cometido en cada medición  $\sigma_i$  y que lo que hacemos es suponer que el error cometido en cada medición es constante:

$$\sigma_i = \sigma = cte$$

con esta suposición las sumas en (6) se convierten en:

$$\begin{aligned}S \xrightarrow{\sigma_i \rightarrow \sigma} S' &= \frac{N}{\sigma^2} \\S_x \xrightarrow{\sigma_i \rightarrow \sigma} S'_x &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^N x_i & S_y \xrightarrow{\sigma_i \rightarrow \sigma} S'_y &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^N y_i \\S_{xx} \xrightarrow{\sigma_i \rightarrow \sigma} S'_{xx} &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^N x_i^2 & S_{xy} \xrightarrow{\sigma_i \rightarrow \sigma} S'_{xy} &= \frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^N x_i y_i\end{aligned}$$

y podemos eliminar  $\sigma$  de las expresiones en los parámetros de ajuste, para escribirlos ahora como:

$$a = \frac{S'_x S'_{xy} - S'_y S'_{xx}}{S_x'^2 - N S'_{xx}} \quad (7)$$

$$b = \frac{S'_x S'_y - N S'_{xy}}{S_x'^2 - N S'_{xx}} \quad (8)$$

Si desconocemos los valores independientes de los errores  $\sigma_i$  y usamos las expresiones (7) y (8) para el ajuste, entonces estamos asumiendo que la curva ajusta a los datos. La valoración del modelo recae en la estimación del error en los parámetros  $\sigma_a$  y  $\sigma_b$  y el coeficiente de correlación  $r$ .

**\*\*A\*\*** Si conocemos los errores individuales ( $\sigma_i$ ):

$$\begin{aligned}\sigma_a^2 &= \frac{S_{xx}}{SS_{xx} - S_x^2} & \sigma_b^2 &= \frac{S}{SS_{xx} - S_x^2} \\r_{ab} &= \frac{-S_x}{\sqrt{SS_{xx}}}\end{aligned}$$



**\*\*B\*\*** Si no los conocemos (o son todos iguales,  $\sigma_i = \sigma$ ):

$$\sigma_a^2 = \frac{\chi^2}{(N-2)} \frac{S'_{xx}}{NS'_{xx} - S_x'^2} \quad \sigma_b^2 = \frac{\chi^2}{(N-2)} \frac{N}{NS'_{xx} - S_x'^2}$$

$$r_{ab} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 - \sum_{i=1}^N (y_i - a - bx_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}}$$