Apuntes de Laboratorio 1

1 de diciembre de 2021

Índice general

Capítulo 1

Medidas y errores

1.1. Introducción

En Física, y en general en Ciencias, no es posible determinar en forma única, con infinita precisión, el valor de una magnitud física por medio de un experimento. Todo experimento tiene asociado algún grado de error, variabilidad, o incertidumbre. Por esto, en la práctica no sólo es relevante conocer el valor de una cierta magnitud, sino también la precisión con la que se determina este valor.

Por ejemplo, el resultado de un experimento que permita medir la aceleración de gravedad en algún lugar particular de la Tierra podrá expresarse en la forma "$x \pm \Delta x$" como

$$g = (9.70 \pm 0.15)\mathrm{m/s}^2 \tag{1.1}$$

Más adelante discutiremos con mayor profundidad lo que el "error" $\pm 0.15\,\mathrm{m/s}^2$ significa, pero por ahora es suficiente enfatizar que este valor determina un rango de valores en el que consideramos que el experimento determina el valor de g: entre $(9.70 - 0.15)\,\mathrm{m/s}^2 = 9.55\,\mathrm{m/s}^2$ y $(9.70 + 0.15)\,\mathrm{m/s}^2 = 9.85\,\mathrm{m/s}^2$, con algún grado de confianza (es decir, una cierta probabilidad. Por ahora, suponga que se tiene completa certeza que el valor de g está en ese intervalo, es decir, 100 % de probabilidad que el valor medido está dentro del rango). Entre más pequeño sea el valor de este error, más precisa será la medida reportada.

Una de las razones por las que debemos considerar el error asociado a las medidas, o más generalmente la incertidumbre de éstas, es que en muchas ocasiones nos interesa poner a prueba la predicción de un modelo o teoría. En otras ocasiones, nos interesará comparar nuestro resultado experimental con otro realizado en forma independiente (por otras personas, por ejemplo), y queremos saber si estos resultados pueden o no ser considerados como coincidentes. También es posible que nuestras mediciones puedan dar evidencia de la existencia de algún nuevo efecto o fenómeno físico. En todos estos casos, el valor del error de la incertidumbre de los datos reportados puede modificar drásticamente la conclusión a la que lleguemos.

Por lo tanto, el objetivo del "análisis de errores" es caracterizar las incertidumbres que toda medidición tiene asociada. Esta preocupación por el análisis de errores no es de importancia sólo en experimentos de pregrado, sino que es (aún más) fundamental en la tarea del investigador.

Incluso las así llamadas "constantes universales" se determinan con cierta incertidumbre[1].

[1] Excepto aquellas que tienen un cierto valor *por definición*. Por ejemplo, la velocidad de la luz en el vacío es hoy en día definida como $c := 299792458\,\mathrm{m/s}$ (exacto!).

Por ejemplo el valor actualmente recomendado[2] para la constante gravitacional G es

$$G = (6.67384 \pm 0.00080) \times 10^{-11}\,\mathrm{m^3 kg^{-1} s^{-2}}, \tag{1.2}$$

correspondiendo a un error relativo de 1.2×10^{-4}.

1.1.1. Diferentes formas de expresar el error de una medida

En la expresión

$$(\bar{x} \pm \Delta x)\ \text{unidades} \tag{1.3}$$

el valor de Δx es llamado **error absoluto**. Otras formas equivalentes de expresar la incertidumbre en el resultado es usando:

- El error relativo: $u_\mathrm{r} := \Delta x/|\bar{x}|$.
- El error porcentual: $u_\mathrm{r} \times 100\,\% = (\Delta x/\bar{x}) \times 100\,\%$.

Nota: El error absoluto habitualmente se expresa con *una cifra significativa*, mientras que tanto el error relativo como porcentual generalmente se expresan con *2 cifras significativas*.

1.2. Precisión y exactitud

Cuando se analizan datos experimentales, existen dos conceptos que es útil distinguir: **precisión** y **exactitud**, puesto que se refieren a propiedades distintas de los datos y de las caracteristias del experimento con el que se obtuvieron. La idea cualitativa de estos conceptos es:

- **Precisión**: Se refiere a una medida de la *dispersión* de los datos asociados a una magnitud física. Una medición es "precisa" si la dispersión de los datos es pequeña, es decir si estos no se diferencian mucho entre sí. Como veremos más adelante, ésta noción está asociada al **número de cifras significativas** que representan una cantidad.
- **Exactitud**: Se refiere al grado en que los valores medidos se acercan al valor "verdadero" o al valor "aceptado"de la magnitud física en cuestión. Claramente, este concepto sólo puede aplicarse si se conoce el "valor real" de una variable (lo que en muchas ocasiones NO ocurre), o si se está comparando con algún valor aceptado por la comunidad científica (típicamente, luego de realizar experimentos independientes que intenten determinar la misma cantidad).

Asociado a los conceptos de precisión y exactitud está la idea de clasificar las fuentes de error en (al menos) tres tipos:

- **Error aleatorio**: La propiedad definitoria de los errores aleatorios es que éstos producen resultados distintos al repetir una misma medición, incluso cuando se intentan dejar inalteradas todas las variables que determinan el resultado de éste. Al repetir una medida varias veces, se obtienen diferentes resultados con una cierta dispersión. Esta dispersión

[2]... por el CODATA (Committee on Data for Science and Technology). Para la recomendación 2010, ver este link y la ref. [1].

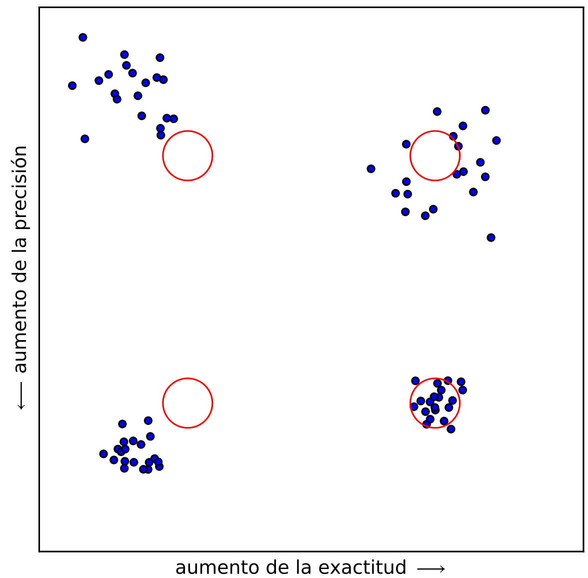

Figura 1.1: Exactitud versus precisión. Código Python aquí.

determina entonces la precisión de los datos obtenidos. Como veremos, una medida de la dispersión de los datos, y por consiguiente de la precisión de la medida, es la **desviación estándar**. Las causas que producen el error aleatorio en un experimento son a menudo clasificadas como "ruidos técnicos" o "ruidos fundamentales". Cada aparato tiene asociado un cierto límite de ruido fundamental determinado por la física asociada a su funcionamiento. Sin embargo, usualmente el ruido técnico es el dominante, y puede deberse a múltiples causas (mecánicas, ambientales, variaciones en la forma en que se preparación del sistema para repetir la medición... y un largo etcétera!). Un(a) buen(a) físic@ experimental tiene experiencia y habilidad en identificar las posibles fuentes de ruido técnico e idear formas de minimizarlo.

- **Error sistemático**: Este tipo de error causa que los valores medidos se desplacen en alguna determinada dirección respecto al valor verdadero o aceptado. Por esto, el error sistemático está relacionado con la exactitud del resultado: a mayor exactitud menor es el error sistemático. Las fuentes de este tipo de error pueden ser una defectuosa calibración del instrumento de medición, o el uso de un método de medición que siempre sobre- o sub-estime la cantidad a determinar.

- **Equivocación**: Este tipo de error, en el que los métodos usados para estimar el error de una medida no son aplicables, se produce típicamente porque alguna persona se equivoca en alguna de sus tareas. Por ejemplo, escribe mal el valor marcado en el instrumento al traspasarlo a su bitácora (en papel, o en una planilla, o en un archivo con los datos, por ejemplo). También puede ocurrir este tipo de error cuando la persona no ha chequeado correctamente la puesta en marcha de su instrumento, o que éste esté midiendo en una escala distinta, etc. etc. Si bien las equivocaciones pueden ser difíciles de distinguir de los errores sistemáticos y aleatorios en la práctica, estos en principio no tienen relación directa con el sistema físico, los instrumentos o el método usado, y en principio pueden ser eliminados repitiendo cuidadosamente el experimento.

En los gráficos de la figura 1.2 se ilustra gráficamente las distintas posibilidades de error aleatorio y sistemático, por medio de **histogramas** (gráficos de barra de número de ocurrencias de las medidas repetidas). En particular, suponemos que el valor verdadero de una variable es 10, y que medimos el valor de esta variable en repetidas oportunidades, para el caso simple en que nuestro instrumento nos suministre sólo valores enteros.

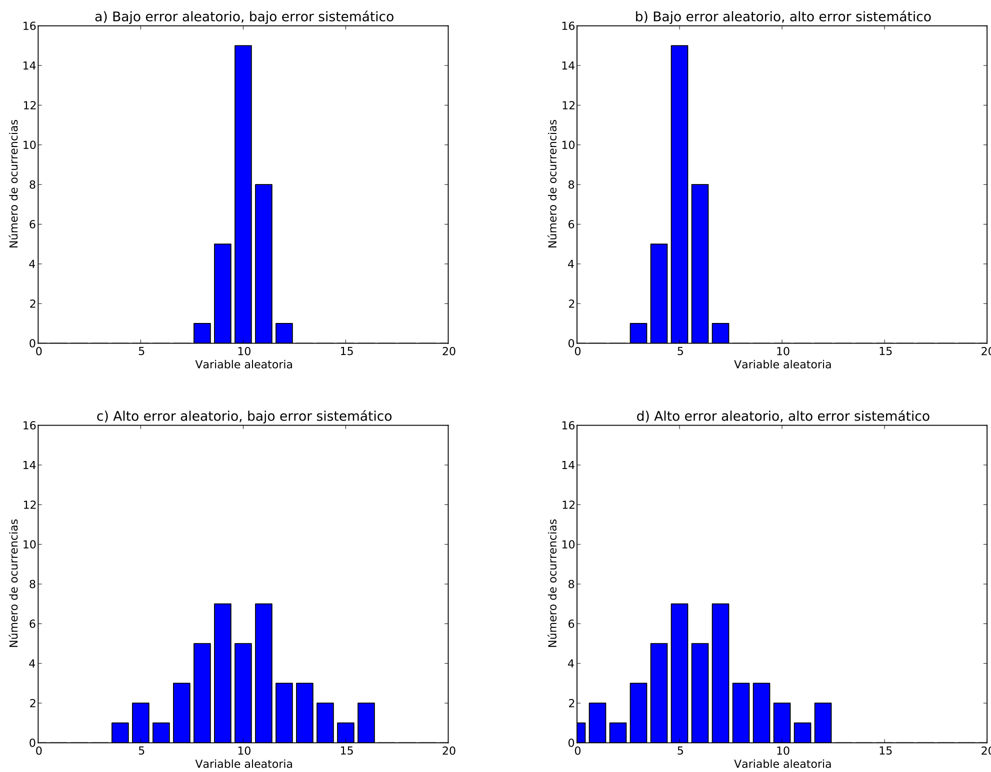

Figura 1.2: Distintas posibilidades para el tamaño del error aleatorio y sistemático. Código Python aquí.

1.3. Promedio y desviación estándar

Cuando se realiza un experimento, generalmente se obtiene un conjunto de valores discretos $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots, N$. En el análisis de estos datos, a menudo son de gran utilidad los conceptos de **media**, **desviación estándar**, **varianza**, **error estándar**, **suma residual de los cuadrados** y la distribución de los datos respecto del valor medio.

La medida estadística más común es la **media**, definida como

$$\bar{x} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \tag{1.4}$$

donde $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots, N$ representan los datos individuales y N el número total de éstos. Equivalentemente, podemos escribir

$$\bar{x} := \frac{1}{N}\sum_{a=1}^{d} n_a x_a, \qquad N = \sum_{a=1}^{d} n_a, \tag{1.5}$$

donde n_a es el **número de veces que se repite el valor** x_a en la muestra y d es el **número de valores distintos** $\{x_a\}$, $a = 1, \ldots, d$.

La medida más común de la variabilidad de un conjunto de datos, es la **desviación estándar** respecto a la media:

$$s := \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}. \tag{1.6}$$

Otro símbolo usando para la misma cantidad es σ_{N-1}, ver por ejemplo [2]. En Python, puede calcular la desviación estándar definida arriba usando la función `std` de Numpy, con la opción `ddof=1`. Por ejemplo, `np.std(x, ddof=1)`.

Otro estimador de la variabilidad, el **error estándar**, es definido por:

$$\alpha := \frac{s}{\sqrt{N}}. \tag{1.7}$$

Si la dispersión de los datos respecto a la media aumenta, s, y α crecen. Por otro lado, si las medidas individuales están muy cerca del valor medio, estas cantidades serán menores. La dispersión también puede representarse por una magnitud llamada **varianza**, que por definición es el cuadrado de la desviación estándar,

$$s^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2. \tag{1.8}$$

El valor del denominador, $N-1$ en lugar de N se elige debido a que sólo existen $N-1$ variaciones *independientes* $(x_i - \bar{x})$, ya que $\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x}) \equiv 0$. Formalmente decimos que se pierde un grado de libertad. Otra justificación es que la dispersión no está definida en caso de tener sólo un dato (en ese caso se obtiene $0/0$).

En términos de los valores distintos $\{x_a\}$, y de su correspondiente número de repeticiones $\{n_a\}$, podemos escribir la varianza como

$$s^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{a=1}^{d} n_a(x_a - \bar{x})^2. \tag{1.9}$$

1.4. Cifras significativas

Al expresar una cierta magnitud física, decimos que su valor tiene un cierto número de **cifras significativas**, es decir, un cierto número de dígitos que, tomando en cuenta la incertidumbre en la determinación de su valor, entregan información relevante del valor de la magnitud en cuestión. Las cifras significativas pueden típicamente dividirse en cifras de las que se está completamente seguro, y en cifras que si bien no se tiene certeza absoluta de su valor, suministran información relavante para estimar el valor de la magnitud. Por ejemplo, la constante gravitacional en (1.2) fue expresada usando 6 cifras significativas ($6, 6, 7, 3, 8$ y 4). Dada la incertidumbre en el valor de esta constante universal, sólo las tres primeras cifras son seguras, mientras que las últimas tres pueden cambiar. Sin embargo, en ese caso se ha considerado que las tres cifras no seguras también tienen información relavante de ser reportada. En general, no existe una regla absoluta y universamente aceptada sobre cómo definir el número de cifras significativas que es necesario o útil de considerar al reportar un cierto resultado experimental. Por contraste, las siguientes reglas son univesalmente aceptadas para definir *cifras que no son significativas*:

- Todos los ceros a la izquierda de una cantidad.
- Ceros a la derecha de una cantidad, en el caso en que éstos indican solamente la escala del número (y/o las unidades de medida usadas).
- Cifras espurias que aparezcan producto de cálculos que van más allá de la precisión que los datos originales determinan y que por este motivo no suministren ninguna información físicamente relevante de la magnitud.

En el caso en que un cero a la derecha de una cantidad se considere como significativo (es decir, que suministra información relavante, ya sea porque es una cifra segura o porque si bien no es segura es la cifra que se considera más probable) se acostumbra a escribir esa cifra explícitamente. Por ejemplo, si decimos que una distancia es $x_1 = 1,70\,\mathrm{km}$, estamos expresando que las cifras 1 y 7 y 0 son significativas, mientras que si escribimos $x_2 = 1,7\,\mathrm{km}$ estamos indicando que sólo 2 cifras son consideradas significativas. Si quieremos expresar las mismas cantidades, pero en unidades de metros y no kilómetros, se acostumbra entonces escribir $x_1 = 1,70 \times 10^3\,\mathrm{m}$ (3 cifras significativas) y $x_2 = 1,7 \times 10^3\,\mathrm{m}$ (2 cifras significativas), respectivamente.

Ejemplos:

$$\begin{array}{ll} 2 & \text{(1 cifra significativa)} \\ 32 & \text{(2 cifras significativas)} \\ 12,470 & \text{(5 cifras significativas)} \\ 12,0010 & \text{(6 cifras significativas)} \\ 0,0023 & \text{(2 cifras significativas)} \\ 000156,210 & \text{(6 cifras significativas)} \\ 2,3 \times 10^5 & \text{(2 cifras significativas)} \end{array} \tag{1.10}$$

Ejercicio

Un(a) estudiante mide el largo de una mesa y como resultado nos entrega la siguiente cantidad $(2,1 \pm 0,5)$ m. Este(a) estudiante, por conveniencia, decide expresar su resultado en milímetros. ¿Cómo tendría que expresar su resultado?, ¿(2100 ± 50) mm?. **Resp.:** No, puesto que esto daría a entender que la cantidad fue expresada con 4 cifras significativas, cuando en realidad sólo tiene 2. La convención para expresar el resultado es: $(2,1 \pm 0,5) \times 10^3\,\mathrm{mm}$.

1.5. Aproximación y Redondeo

Si queremos expresar el número $\pi = 3,14159265358979\cdots$ con n cifras significativas, debemos desechar todas las cifras que se encuentren a la derecha del enésimo lugar. Además, se adoptan las siguientes reglas para *redondear* la n-ésima cifra:

1. Si la cifra que se encuentra en el lugar $(n+1)$ es mayor que 5, se le agrega una unidad a la cifra que se encuentra en el lugar enésimo.

2. Si la cifra que se encuentra en el lugar $(n+1)$ es menor que 5, dejamos la cifra enésima inalterable.

3. Si la cifra que se encuentra en el lugar $(n+1)$ es igual a 5, adoptaremos la siguiente *convención*:

   - Si la enésima cifra es impar, se le agrega una unidad.
   - Si la enésima cifra es par la dejamos inalterable.

   Esta convención intenta evitar la introducción del error sistemático que se agregaría si, por ejemplo, redondearamos siempre "hacia arriba" la n-ésima cifra. En Python, estas reglas están implementadas en la función `round` de Numpy, ver la documentación.

Note que estas convenciones de redondeo se aplican al valor principal de una magnitud física y no al error asociado, puesto que este último siempre se redondea a la cifra superior.

1.6. Orden de magnitud

Es la potencia de diez más cercana. Ejemplos:

- 6.7 es de orden 10^1 (está más cerca de 10 que de 1).
- 5.3 es de orden 10^0 (está más cerca de 1 que de 10).
- 128.9 es de orden 10^2 (está más cerca de 100 que de 1000).

1.7. Precisión, sensibilidad, y cifras significativas

En Física (y otras ciencias), estamos especialmente interesad@s en distinguir las cifras que son relevantes a la hora de expresar el resultado de una cantidad física, de las que no lo son, *a partir de la precisión con la que medimos o calculamos la cantidad* en cuestión. Por ejemplo, si medimos una única vez el ancho de una hoja con una regla (o similar) que tiene una escala con una graduación mínima de un milímetro (decimos que la **sensibilidad del instrumento** es un 1 mm), y vemos que el valor buscado está en la zona interior entre las marcas de la regla correspondientes a $21.5\,\mathrm{cm}$ y $21.6\,\mathrm{cm}$, podríamos expresar el resultado con

4 cifras significativas: $(21.55 \pm 0.05)\,\mathrm{cm}$, o bien $(215.5 \pm 0.5)\,\mathrm{mm}$. En este caso, la última cifra considerada como significativa es *estimada*, es decir, aproximada por el criterio de la persona que realiza la medida. En este ejemplo, siendo conservadores (o pesimistas) aseguraremos que (con 100 % de confianza), el ancho de la hoja está comprendido en el intervalo entre $21.5\,\mathrm{cm}$ y $21.6\,\mathrm{cm}$ de modo que (en el peor de los casos) tendremos 2 cifras seguras (2 y 1) y dos cifras que podrían variar, pero que nos entregan información física relevante a la medición. Por el contrario, en este tipo de medición no tiene ningún sentido físico reportar que el ancho de la hoja, medido con la misma regla, es $21.55275165359\,\mathrm{cm}$ puesto que las cifras 275165359 no son para nada confiables (la cifra anterior, 5, ya corresponde a una estimación que realizó la persona que realizó la medida). En general, toda cifra que está más a la derecha de la posición que la precisión de la medida determina es considerada como no significativa (a menos que existen muy buenos argumentos para considerar lo contrario!).

Para estimar la precisión que determina (entre otras cosas) el número de cifras significativas con las que se reporta un resultado o, equivalentemente el error o incertidumbre de la medida es útil considerar varios casos:

1.7.1. Caso de una única medición

En este caso se hace, a su vez, la distinción entre:

- **Medición realizada con un instrumento analógico**: Aquí decimos que la sensibilidad del instrumento es el valor de la mínima subdivisión en la escala que éste posee. Para la regla considerada en el ejemplo anterior, decimos que su sensibilidad es 1 mm. Es razonable considerar la incertidumbre o error de una medida realizada con un instrumento analógico como la mitad del valor de su sensibilidad: 0.5 mm en el caso de la regla. Esta es la "elección conservadora" para el error de la medida[3]

- **Medición realizada con un instrumento digital**: Suponga que mide el mismo ancho de la hoja, pero ahora usando un instrumento digital[4]), que suministra valores discretos en una pantalla, por ejemplo "21.57" cm. ¿Qué error asociamos a la medida?. Nuevamente, la respuesta no es única, puesto que depende de cómo exactamente funciona el dispositivo, y de cómo realiza el redondeo y/o truncamiento de cifras que finalmente son mostradas en la pantalla. Algunos instrumentos digitales traen consigo especificaciones técnicas del fabricante que establecen que el error debe considerarse como "la mitad del último dígito" . En nuestro ejemplo reportaríamos entonces que el ancho es $(21.570 \pm 0.005)\mathrm{cm}$ (el último 0 sería una cifra significativa en este caso) o, equivalentemente, que el valor está en el intervalo entre $21.565\,\mathrm{cm}$ y $21.575\,\mathrm{cm}$. Como podemos ver, este caso requiere

[3]En algunas ocasiones, sin embargo, esta elección puede ser claramente demasiado pesimista. Considere por ejemplo que se mide el mismo ancho de la hoja, pero con una regla que tenga una sensibilidad de 1 cm (la menor graduación marcada en ella). En este caso la medida quedará entre 21 cm y 22 cm, y el error "conservador" asociado sería de ± 0.5 cm, pudiendo expresar el resultado como (21.5 ± 0.5)cm que, al ojo humano sano, puede parecer muy pesimista. Un(a) físic(a) experimental con experiencia y habilidad podría ser capaz de realizar una mejor estimación de la última cifra y acotar el error asociado asegurando, por ejemplo, que el ancho está entre 21.1 cm y 21.7 cm y por lo tanto informe que (21.4 ± 0.3)cm. Dado que no existe una receta general y 100 % aceptada de cómo proceder en estos casos (que aseguren que las personas que reciben el resultado tengan confianza en él), adoptaremos aquí la postura "pesimista", es decir, consideraremos que el error de una medición es igual a la mitad de la sensibilidad del instrumento.

[4]¿Cómo podría hacer esto?, ¿Con qué instrumento?

que el instrumento (internamente) **redondee** (aproxime) el valor de la medida, y que no simplemente **trunque** (corte) el valor. En el caso que se desconozcan los detalles técnicos del instrumento y/o si éste aproxima o trunca las cifras es preferible, nuevamente, adoptar la postura "conservadora" y considerar como error de la medida a la unidad correspondiente al último dígito que el instrumento indica. En nuestro ejemplo, $\pm 0.01\mathrm{cm}$, y reportar que $(21.57 \pm 0.01)\mathrm{cm}$.

1.7.2. Caso de mediciones repetidas

En este caso, es necesario a recurrir a herramientas estadísticas para caracterizar algunos aspectos de la precisión de los resultados, puesto que es esencial tomar en cuenta que se realizan varias (idealmente, muchas) medidas, y que éstas en general no arrojarán los mismos valores, por lo que los datos estudiados tendrán cierta dispersión. Existen distintas cantidades que son útiles para caracterizar el valor característico y la dispersión en los datos, pero que necesariamente reducen la riqueza y complejidad éstos. Teniendo esto en cuenta, es posible usar (por ejemplo) el promedio ($\bar{x}$) y la desviación estándar (σ) (es decir, sólo dos valores!) para expresar el valor característico y el "error" de una magnitud física que queremos determinar a partir de muchas medidas individuales. Hay, sin embargo, un precio que pagar: es necesario incluir además un valor para la **probabilidad de que el valor buscado esté dentro de cierto intervalo** (por ejemplo, $\bar{x} \pm \sigma$).

1.8. Propagación de incertezas

Inevitablemente, siempre que calculemos una magnitud física a partir de otras sujetas a incerteza/error, ésta incerteza se propagará a la cantidad calculada. Existen varias formas de calcular la incerteza de la magnitud calculada a partir de la expresión analítica que la define y de incertezas de las magnitudes originales. Si la relación es simple es posible encontrar expresiones analíticas exactas para el error propagado. En otros casos también es posible encontrar expresiones analíticas aproximadas cuando el error de las magnitudes originales es suficientemente pequeño. Actualmente es también muy común evaluar numéricamente el error propagado, puesto que este método puede ser usado cuando la relación entre las variables en muy complicada y además cuando el error no necesariamente es pequeño.

Un caso simple donde es posible encontrar una expresión analítica exacta para el error propagado es en el caso de la suma y resta de dos magnitudes:

- **Suma:** Si $y = x_1 + x_2$, $x_1 = \bar{x}_1 \pm \Delta x_1$ y $x_2 = \bar{x}_2 \pm \Delta x_2$, entonces

$$\bar{y} = \bar{x}_1 + \bar{x}_2, \qquad \Delta y = \Delta x_1 + \Delta x_2. \tag{1.11}$$

- **Resta:** Si $y = x_1 - x_2$, entonces

$$\bar{y} = \bar{x}_1 - \bar{x}_2, \qquad \Delta y = \Delta x_1 + \Delta x_2. \tag{1.12}$$

En el caso de la multiplicación y división la situación es menos simple:

- **Multiplicación:** Si $y = x_1 x_2$, (y suponiendo x_1 y x_2 positivos)

$$y_{\min} = (\bar{x}_1 - \Delta x_1)(\bar{x}_2 - \Delta x_2), \qquad y_{\max} = (\bar{x}_1 + \Delta x_1)(\bar{x}_2 + \Delta x_2). \tag{1.13}$$

Vemos aquí que el punto medio no coincide con el valor que se obtendría sin considerar el error, ya que

$$\frac{1}{2}\left(y_{\min} + y_{\max}\right) = \bar{x}_1\bar{x}_2 + \Delta x_1 \Delta x_2, \tag{1.14}$$

en otras palabras, el intervalo $[y_{\min}, y_{\max}]$ no es simétrico respecto a $\bar{x}_1\bar{x}_2$.

Esta asimetría puede ignorarse si los errores relativos de x_1 y x_2 son suficientemente pequeños, de modo que $u_r^{x_1} \ll 1$ y $u_r^{x_2} \ll 1$. En este caso,

$$\frac{1}{2}\left(y_{\min} + y_{\max}\right) \approx \bar{x}_1\bar{x}_2, \tag{1.15}$$

y podemos expresar el valor de y como $\bar{y} \pm \Delta y$, con

$$\bar{y} \approx \bar{x}_1\bar{x}_2, \qquad \Delta y = x_2 \Delta x_1 + x_1 \Delta x_2, \tag{1.16}$$

o, equivalentemente,

$$u_r^y \approx u_r^{x_1} + u_r^{x_2}. \tag{1.17}$$

- **División:** Si $y = x_1/x_2$, y suponiendo x_1 y x_2 positivos, tendremos una situación similar. Los valores extremos estarán dados por

$$y_{\min} = \frac{\bar{x}_1 - \Delta x_1}{\bar{x}_2 + \Delta x_2}, \qquad y_{\max} = \frac{\bar{x}_1 + \Delta x_1}{\bar{x}_2 - \Delta x_2}, \tag{1.18}$$

por lo que el valor medio y el ancho del intervalo son dados por

$$\frac{1}{2}\left(y_{\min} + y_{\max}\right) = \frac{\bar{x}_1\bar{x}_2 + \Delta x_1 \Delta x_2}{\bar{x}_2^2 - (\Delta x_2)^2}, \qquad \frac{1}{2}\left(y_{\max} - y_{\min}\right) = \frac{\bar{x}_2 \Delta x_1 + \bar{x}_1 \Delta x_2}{\bar{x}_1^2 - (\Delta x_1)^2}. \tag{1.19}$$

El punto medio sólo coincide aproximadamente con el valor $\bar{x}_1/\bar{x}_2$ si el error (relativo) es muy pequeño. Suponiendo que esto es cierto, podremos escribir $y = \bar{y} \pm \Delta y$, con

$$\bar{y} \approx \frac{\bar{x}_1}{\bar{x}_2}, \qquad \Delta y \approx \frac{1}{x_2}\Delta x_1 + \frac{x_1}{x_2^2}\Delta x_2 \tag{1.20}$$

o, equivalentemente,

$$u_r^y \approx u_r^{x_1} + u_r^{x_2}. \tag{1.21}$$

- **Potencias:** Es simple generalizar los resultados anteriores al caso en que $y = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2}$, el intervalo de valores posibles de y tampoco será simétrico respecto al valor calculado sin tomar en cuenta los errores de cada variable: $\bar{y} = \bar{x}_1^{\alpha_1}\bar{x}_2^{\alpha_2}$. Sin embargo, en el caso en que los errores relativos satisfagan $u_r^{x_1} \ll 1$ y $u_r^{x_2} \ll 1$ podremos escribir

$$\bar{y} \approx \bar{x}_1^{\alpha_1}\bar{x}_2^{\alpha_2}, \qquad u_r^y \approx |\alpha_1| u_r^{x_1} + |\alpha_2| u_r^{x_2}. \tag{1.22}$$

Ejemplo: Suponga que determinamos el volumen de un gas a partir de la ecuación para un gas ideal,

$$V(p,T,n,R) = \frac{nRT}{p}, \tag{1.23}$$

donde cada magnitud física es medida con su respectivo error asociado:

$$p = (100 \pm 3) \times 10^3 \text{ Pa}, \quad T = (300.0 \pm 0.2) \text{ K}, \quad n = (0.10 \pm 0.01) \text{ mol}, \tag{1.24}$$

mientras que de una tabla de datos se obtiene

$$R = (8.31 \pm 0.01) \text{ J/mol K}. \tag{1.25}$$

El valor principal del volumen:

$$\bar{V} = V(\bar{p},\bar{T},\bar{n},\bar{R}) \approx 0.002493 \text{ m}^3. \tag{1.26}$$

Ahora evaluaremos el error relativo asociado con el volumen, usando

$$\begin{aligned} u_r^V &\approx u_r^n + u_r^R + u_r^T + u_r^p && (1.27)\\ &\approx \frac{0.01}{0.1} + \frac{0.01}{8.31} + \frac{0.2}{300} + \frac{3}{100} && (1.28)\\ &\approx 0.1 + 0.0012 + 0.00067 + 0.03 && (1.29)\\ &\approx 0.132. && (1.30) \end{aligned}$$

Con esto, el error absoluto ΔV queda determinado por

$$\Delta V = \bar{V} u_r^V \approx (0.002493 \text{ m}^3)(0.13) \approx 3.3 \times 10^{-4} \text{ m}^3. \tag{1.31}$$

Tomando en cuenta el error calculado, expresamos el resultado final truncando el valor de $\bar{V}$ de acuerdo a las reglas antes descritas:

$$V \approx (0.002493 \pm 0.00033) \text{ m}^3 \approx (2.49 \pm 0.33) \times 10^{-3} \text{ m}^3. \tag{1.32}$$

Ejemplo: Supongamos que queremos medir el periodo de un péndulo y, medimos el tiempo que tarda en hacer 10 oscilaciones, con un cronómetro (digital) de sensibilidad $0.1\,\mathrm{s}$. Si el tiempo total es de $t = (4.6 \pm 0.1)\,\mathrm{s}$, tendremos que el periodo medio es

$$\bar{P} = \frac{\bar{t}}{10} = \frac{4.6\,\mathrm{s}}{10} = 0.46\,\mathrm{s}. \tag{1.33}$$

Y el error puede ser estimado usando

$$\Delta P = \frac{0.1\,\mathrm{s}}{10} = 0.01\,\mathrm{s}, \tag{1.34}$$

de modo que

$$P = (0.46 \pm 0.01)\,\mathrm{s}. \tag{1.35}$$

Note que por el solo hecho de haber medido el tiempo de 10 oscilaciones consecutivas y haber calculado a partir de éste el tiempo de una única oscilación parece que hemos aumentado la precisión de la medida, tal como si usáramos un instrumento 10 veces más sensible. Si bien este método es apropiado y usado en muchas ocasiones, existe un "precio que pagar" por este aumento efectivo de la precisión: *hemos supuesto que el periodo de oscilación del péndulo durante las 10 oscilaciones permanece inalterado*. Esta es una hipótesis física adicional introducida, que puede o no ser cierta. En otras palabras, si el periodo de oscilación del péndulo no permanece constante durante las 10 oscilaciones, la cantidad calculada es simplemente el valor promedio de los periodos y no necesariamente el valor que se busca determinar.

Ejemplo: La ley de gravitación universal de Newton, determina la fuerza $\vec{F}$ entre dos masas (muy pequeñas) m_1 y m_2 separadas por una distancia d, de modo que $F = Gm_1m_2/d^2$. En un experimento se quiere determinar la constante gravitacional con un error relativo $u_G \approx 10^{-3}$, usando

$$G = \frac{Fd^2}{m_1m_2}. \tag{1.36}$$

Para esto, se ubican dos masas iguales $m_1 = m_2 = (100\,\mathrm{kg} \pm 1\,\mathrm{g})$ a una distancia $d \approx 0.5\,\mathrm{m}$, y se mide la fuerza entre las masas, con un error relativo $u_F = 2 \times 10^{-4}$. Determine el error absoluto con el que deben medirse la distancia d que el error relativo de G sea el deseado.

Solución: En este caso, los errores relativos conocidos son mucho menores que 1, ya que

$$u_r^F = 2 \times 10^{-4}, \qquad u_r^m = \frac{1\,\mathrm{g}}{100\,\mathrm{kg}} = 10^{-5}, \qquad u_r^G \approx 10^{-3}, \tag{1.37}$$

de modo que podemos usar la expresion aproximada para el error relativo propagado:

$$u_r^G \approx u_r^F + 2u_r^d + 2u_r^m. \tag{1.38}$$

Despejando u_r^d, obtenemos

$$u_r^d \approx \frac{1}{2}\left(u_r^G - 2u_r^F - 2u_r^m\right) \tag{1.39}$$

$$\approx \frac{1}{2}\left(10^{-3} - 4 \times 10^{-4} - 2 \times 10^{-5}\right) \tag{1.40}$$

$$\approx 4 \times 10^{-4}. \tag{1.41}$$

El valor del error absoluto de las medidas de d debe entonces ser aproximadamente de $\Delta r = r \cdot u_r^r \approx (0.5m)(4 \times 10^{-4}) \approx 0.2\,\mathrm{mm}$.

1.8.1. Funciones arbitrarias y error suficientemente pequeño

Si $y = y(x)$, y $x = \bar{x} \pm \Delta x$ entonces

$$\Delta y \approx \Delta x \left|\frac{dy}{dx}(\bar{x})\right|. \tag{1.42}$$

Si $y = y(x_1, x_2, \ldots, x_m)$, y $x_\alpha = \bar{x}_\alpha \pm \Delta x_\alpha$, $\alpha = 1, \ldots, m$ entonces

$$\Delta y \approx \sum_{\alpha=1}^{m} \Delta x_\alpha \left|\frac{\partial y}{\partial x_\alpha}(\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_m)\right|. \tag{1.43}$$

1.8.2. Evaluación numérica

Capítulo 2

Ajuste de curvas

2.1. Modelos de regresión

Generalmente, al realizar un experimento se obtiene como resultado un conjunto de puntos discretos y, como ya hemos mencionado, en muchas ocasiones se requiere modelar la *dependencia funcional* entre dichos puntos. En otras ocasiones se requieren puntos *entre* esos valores discretos. Para lograr algunos de estos objetivos se requiere de **técnicas de ajuste de curvas** tanto para obtener valores intermedios como para determinar la forma en que se relacionan dichas variables. Otras veces, lo que se busca es una expresión simplificada de una función muy complicada, que se ajuste bien en algún rango deseado. Para encontrar esta función simplificada, suele evaluarse la función más complicada para varios puntos y tratar estos puntos con el mismo criterio de ajuste que los datos obtenidos experimentalmente.

Las técnicas de ajuste las separaremos en dos grupos generales:

1. Cuando los datos obtenidos muestran imprecisión, es decir un grado significativo de error aleatorio (ruido) y lo que se busca es determinar la *tendencia* y no necesariamente un modelo que describa detalladamente cada variación sistemática de los datos experimentales.

   La estrategia aquí es encontrar una curva, dentro de una familia dada, que represente el comportamiento general, es decir, ajustar un modelo. Dicho modelo no necesariamente interceptará cada uno de los puntos. No debemos olvidar que estamos estudiando el caso donde los datos presentan ruido y por este motivo es que no podemos considerar cada punto de manera individual, ya que éste podría ser incorrecto. Con este criterio de búsqueda nos queda claro que el modelo (la dependencia funcional entre las variables) que deseamos encontrar debe describir el patrón del conjunto de puntos o datos experimentales. Para este caso usaremos un **modelo de regresión**.

2. Cuando los datos obtenidos muestran una gran precisión o un grado mínimo de error aleatorio (poco ruido) y lo que se desea determinar son valores entre datos experimentales sin estar interesados en modelar el fenómeno, es decir, no se está buscando la dependecia entre las variables involucradas.

   En este caso, tenemos como objetivo encontrar una curva o una serie de curvas que pasen exactamente por cada uno de los puntos. La diferencia fundamental con el caso anterior es que cada punto se considera como correcto.

A la estimación de valores entre puntos discretos se le conoce con el nombre de **interpolación**.

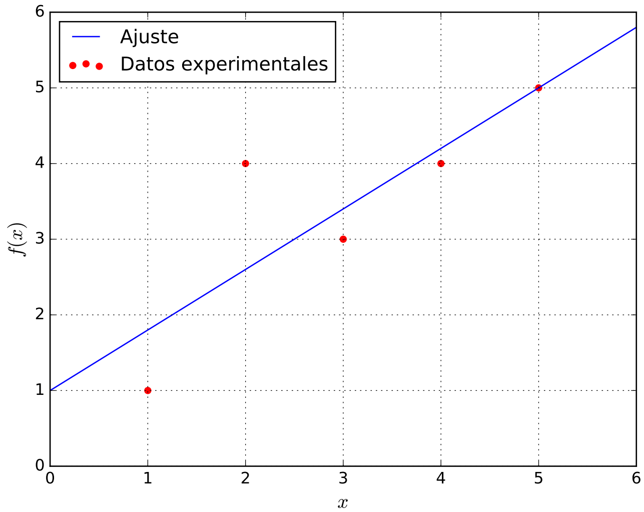

Figura 2.1: Ajuste lineal. Código Python aquí.

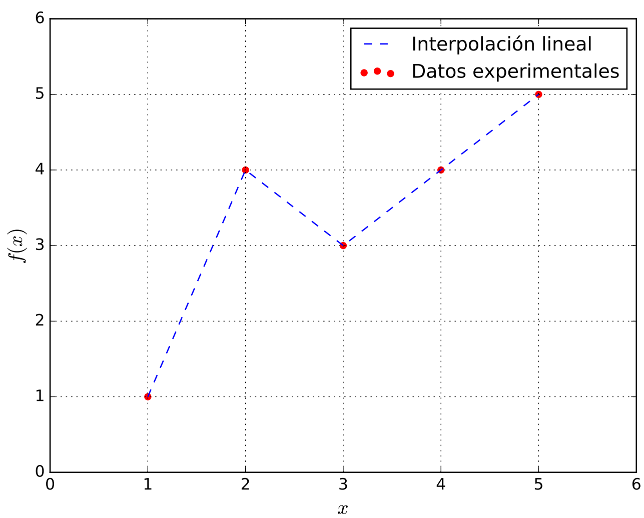

Figura 2.2: Interpolación lineal. Código Python aquí.

Suponga que se obtiene experimentalmente un conjunto de datos que son presentados en las figuras 2.1-2.1.

El primer intento de ajuste (ver fig. 2.1), no pretende conectar los puntos, sólo trata de

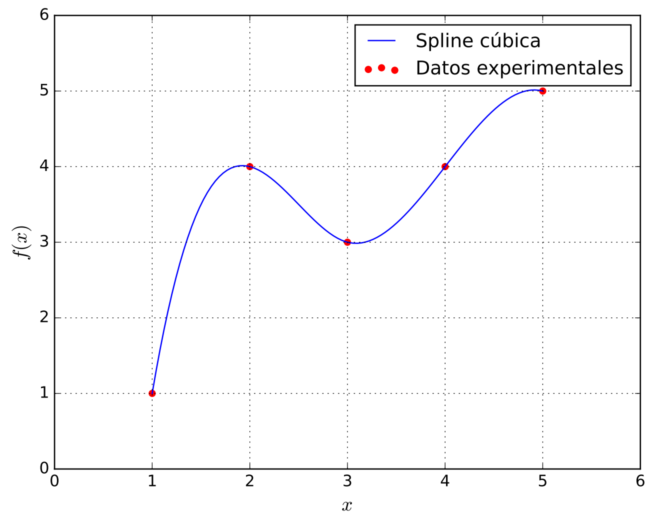

Figura 2.3: Interpolación spline cúbica. Código Python aquí.

caracterizar el crecimiento de los datos mediante una línea recta. Esta técnica ofrecería una estimación adecuada solamente para el caso lineal. Para el segundo caso (ver fig. 2.1) se utilizaron segmentos rectos entre cada par de puntos, es decir, una **interpolación lineal** que conecta dichos puntos. Esta técnica, ofrecería una estimación adecuada solamente para el caso donde los puntos están muy cercanos unos de otros y cada uno de ellos hubiese sido medido con un error aleatorio mínimo, tal que cada punto sea significativo.

Sin embargo, cuando la relación subyacente es altamente no-lineal o cuando los datos están muy separados entre si, se pueden introducir errores importantes al realizar una interpolación lineal. En el tercer caso (ver fig. 2.1) se usaron curvas que intentan capturar el comportamiento general de los datos. Este criterio para ajustar la curva será el adecuado si cada uno de los puntos del conjunto de datos está medido con un error suficientemente grande tal que el conjunto nos de información del comportamiento general, pero no cada uno de los puntos individualmente.

Lo comentado deja de manifiesto la necesidad de desarrollar métodos sistemáticos y objetivos con el propósito de determinar la curva más adecuada, ya sea para modelar o interpolar.

El **análisis de tendencias** representa el proceso de usar el patrón de los datos y hacer predicciones, pudiéndose usar polinomios de interpolación para el caso en que los datos fueron tomados con alta precisión. Este tipo de análisis se usa para predecir valores de la variable dependiente, **interpolaciones** (predecir dentro del rango de datos medidos). Otra de las aplicaciones del ajuste de curvas experimentales consiste en poner a prueba hipótesis. Esto consiste en comparar nuestro modelo teórico con los valores medidos. Pudiendo a veces ajustar los coeficientes desconocidos del modelo para que éste se ajuste mejor al experimento.

Finalmente, estos métodos de ajuste pueden usarse para derivar funciones simples que se aproximen, dentro de un rango, a funciones complicadas.

2.2. Regresión Lineal Simple

Este modelo considera sólo una variable independiente x y una variable dependiente y, y supone que la relación subyacente entre la variable independiente y dependiente es lineal, es decir,

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x, \tag{2.1}$$

donde el coeficiente de posición α_0 y la pendiente α_1 son los coeficientes desconocidos de la regresión.

Por otro lado, supongamos que cada una de las observaciones de Y quede descrita por el siguiente modelo

$$y_i = \alpha_0 + \alpha_1 x_i + \epsilon_i \tag{2.2}$$

donde ϵ_i son los residuos de la regresión y son interpretados como un *error aleatorio* (valores no correlacionados) con valor medio igual a cero.

A partir de un conjunto de datos experimentales (una muestra) podemos hacer estimaciones a_0 y a_1 de los coeficientes α y α_1. Un método comúnmente usado para estimar dichos parámetros es el **método de mínimos cuadrados**.

La suma de los cuadrados de las diferencias entre los datos medidos y la predicción realizado por el modelo propuesto (o **residuos**) está dada por

$$\chi^2(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{N} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2. \tag{2.3}$$

Minimizando la suma de los cuadrados con respecto a los coeficientes desconocidos, obtenemos los estimadores a_0 y a_1 de los parámetros α_0 y α_1. Las ecuaciones que determinan los estimadores son

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^{N} (y_i - a_0 - a_1 x_i) = 0, \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{N} (y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i = 0. \tag{2.5}$$

Simplificando y reordenando términos, obtenemos:

$$N a_0 + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i = \sum_{i=1}^{N} y_i, \tag{2.6}$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 = \sum_{i=1}^{N} y_i x_i, \tag{2.7}$$

$$\begin{pmatrix} N & \sum_{i=1}^{N} x_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_i & \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{N} x_i \\ \sum_{i=1}^{N} y_i x_i \end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

Resolviendo el sistema se obtiene

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x}, \tag{2.9}$$

$$a_1 = \frac{N\left(\sum_{i=1}^N y_i x_i\right) - \left(\sum_{i=1}^N y_i\right)\left(\sum_{i=1}^N x_i\right)}{N\left(\sum_{i=1}^N x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2} = \frac{\overline{xy} - (\bar{x})(\bar{y})}{\overline{x^2} - (\bar{x})^2}, \tag{2.10}$$

donde $\bar{x}$, $\bar{y}$, $\overline{xy}$ y $\overline{x^2}$ representan los promedios de $\{x_i\}$, $\{y_i\}$, $\{x_i y_i\}$ y $\{x_i^2\}$ respectivamente.

Una manera de cuantificar la dispersión de los datos en torno del modelo es calcular la desviación estándar

$$S_{Y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{N-2}}, \tag{2.11}$$

con

$$S_r = \sum_{i=1}^N (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2. \tag{2.12}$$

Note que para ajustar el modelo se introdujeron dos valores medios, es decir, se perdieron dos grados de libertad. Otra justificacion del término $N-2$ en el cálculo de la varianza es que si ajustamos una recta para sólo dos puntos no habría dispersión.

Además, el *coeficiente de determinación* r^2 es definido por

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}, \tag{2.13}$$

donde

$$S_t = \sum_{i=1}^N \left(y_i - \bar{y}\right)^2, \tag{2.14}$$

$$S_r = \sum_{i=1}^N (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2. \tag{2.15}$$

Así r^2 cuantifica la mejora del ajuste respecto del promedio y lo normaliza respecto a las desviaciones de la media S_t.

Si $r^2 = 1$ la recta obtenida pasa exactamente por los todos puntos ajustados. Por otro lado, $r^2 = 0$ significa que el modelo no representa ninguna mejora respecto del ajuste "trivial" consistente en ajustar un valor constante igual al promedio de los datos.

En este punto es conveniente mencionar que un coeficiente de determinación con valor cercano a 1, no significa necesariamente que el modelo ajustado es el más adecuado. Se recomienda, luego de graficar y evaluar el coeficiente de determinación, graficar los residuos con el proposito de intentar identificar algun patrón en ellos, o en su defecto que pueden considerarse como aleatorios. En este sentido es útil además construir un **histograma de los residuos**.

Note que en el caso lineal, y como consecuencia de la ecuación (2.4), el método de mínimos cuadrados asegura que *el promedio de los residuos es nulo*.

Ejemplo: Ver figura 2.1

*** Agregar ejemplo de `scipy.stats.linregress` ***

2.3. Regresión Polinomial

Algunos datos se representan pobremente mediante una línea recta. Para estos casos es mejor usar otro tipo de modelos. Por ejemplo, la llamada **regresión polinomial** se basa en

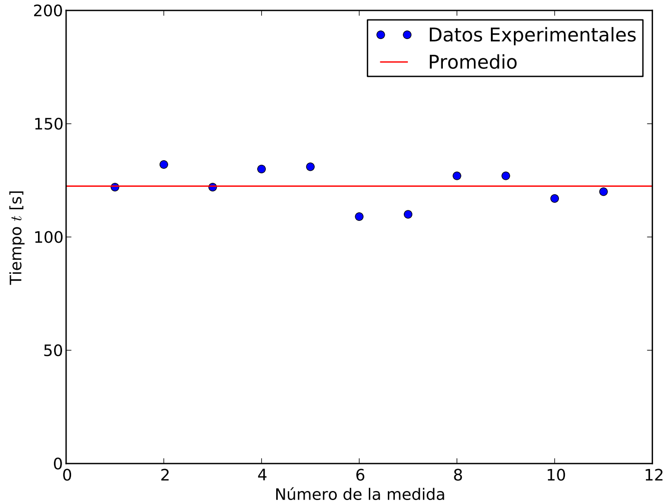

Figura 2.4: El ajuste por una constante es equivalente a calcular el promedio. Código Python en apéndice **??**.

ajustar el siguiente polinomio de grado m:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m. \tag{2.16}$$

En este caso

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \cdots - a_m x_i^m\right)^2, \tag{2.17}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \cdots - a_m x_i^m\right), \tag{2.18}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{N} x_i \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \cdots - a_m x_i^m\right), \tag{2.19}$$

$$\vdots \quad = \quad \vdots \tag{2.20}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_p} = -2 \sum_{i=1}^{N} x_i^p \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \cdots - a_m x_i^m\right), \tag{2.21}$$

$$\vdots \quad = \quad \vdots \tag{2.22}$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_m} = -2 \sum_{i=1}^{N} x_i^m \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \cdots - a_m x_i^m\right). \tag{2.23}$$

Igualando a cero y reordenando términos, obtenemos

$$a_0 N + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 + \cdots + a_m \sum_{i=1}^{N} x_i^m = \sum_{i=1}^{N} y_i, \tag{2.24}$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^3 + \cdots + a_m \sum_{i=1}^{N} x_i^{m+1} = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i, \tag{2.25}$$

$$\vdots \quad = \quad \vdots \tag{2.26}$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i^p + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^{p+1} + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^{p+2} + \cdots + a_m \sum_{i=1}^{N} x_i^{p+m} = \sum_{i=1}^{N} x_i^p y_i, \tag{2.27}$$

$$\vdots \quad = \quad \vdots \tag{2.28}$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{N} x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^{N} x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=1}^{N} x_i^{m+2} + \cdots + a_m \sum_{i=1}^{N} x_i^{2m} = \sum_{i=1}^{N} x_i^m y_i. \tag{2.29}$$

Note que el número de incógnitas $(a_0, a_1, a_2, \cdots a_m)$ es igual al número de ecuaciones $(m+1)$. El sistema de ecuaciones anterior es lineal en las incógnitas, y puede escribirse en la forma estándar como sigue:

$$\begin{pmatrix} N & \sum x_i & \cdots & \sum x_i^k & \cdots & \sum x_i^m \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^{k+1} & \cdots & \sum x_i^{m+1} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^p & \sum x_i^{p+1} & \cdots & \sum x_i^{p+k} & \cdots & \sum x_i^{p+m} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \cdots & \sum x_i^{k+m} & \cdots & \sum x_i^{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^p y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^m y_i \end{pmatrix}. \tag{2.30}$$

Ejemplo: Ajustar un polinomio de grado 2, para la siguiente tabla de valores 2.1.

Posición x, [m] $\pm 0,1$	Tiempo t, [s] $\pm 0,01$
0.00	2.1
1.00	7.7
2.00	13.6
3.00	27.2
4.00	40.9
5.00	61.1

Tabla 2.1: Posición de un movimiento unidimensional como función del tiempo.

2.4. Método de Mínimos Cuadrados para una función arbitraria

Discutiremos ahora el caso en el que la función que queremos ajuster ("el modelo") no es un polinomio, sino una función en principio arbitraria, $f(x)$, que dependa de algunos parámetros a determinar.

Esto consiste en definir la siguiente funcional:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(x_i))^2 . \tag{2.31}$$

Tal como en los casos anteriore, χ^2 satisface:

1. χ^2 es una magnitud definida como positiva, es decir $\chi^2 \geq 0$.

2. $\chi^2 = 0$ si y sólo si $y_i = f(x_i)$, $\forall i$, es decir, si la función pasa exactamente por todos los puntos.

Normalmente no se cumple la condición $y_i = f(x_i)$, por lo que χ^2 nunca es cero. La forma de determinar los parámetros ajustables de la función f es hacer que χ^2 sea lo más próximo a cero, lo que se logra *minimizando* su valor con respecto a los parámetros ajustables. Al realizar esto, se obtiene una función que describe, sólo de manera aproximada, la tendencia general de los puntos experimentales. Por lo tanto, el problema de encontrar f se traduce en minimizar la funcional χ^2 para una familia de funciones dada.

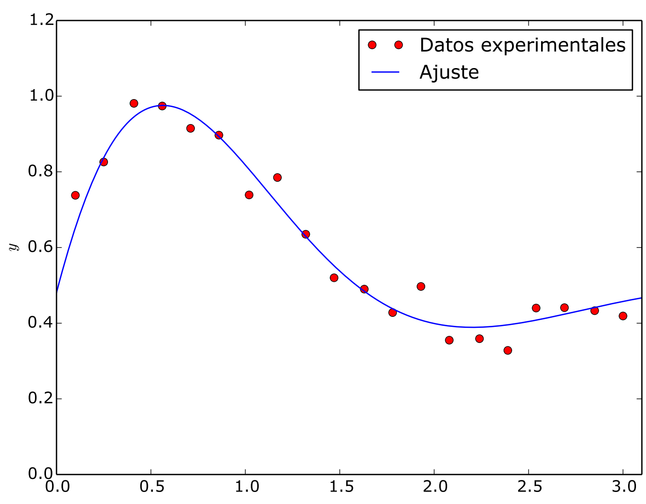

Figura 2.5: Ajuste no-polinomial de datos usando el método de mínimos cuadrados. Código Python en apéndice ??.

2.4.1. Implementación en Python

En Python existen varios módulos y funciones que implementan el MMC para una función arbitraria. En general éstos se basan en algoritmos "de optimización.en los que se busca que alguna función "objetivo" sea máxima (o mínima). En nuestro caso, se buscan los parámetros de la función $f(x)$ tales que el valor de χ^2 sea el mínimo (o, equivalentemente que $-\chi^2$ sea máximo). Varios métodos de optimización están implementados en el módulo `scipy.optimize` de Scipy, en particular la función `scipy.optimize.minimize`. Sin embargo, para el caso particular de aplicación de este tipo de métodos al problema del ajuste de curvas por medio del MMC, existen funciones específicas más cómodas de usar, tales como `scipy.optimize.least_squares` o bien `scipy.optimize.curve_fit` (que, de hecho, llama internamente a `scipy.optimize.least_squares`).

2.5. Método de mínimos Cuadrados Ponderados

Si el error o incerteza de los valores de y_i no es constante podemos introducir una mejora para estimar los parámetros de ajuste por mínimos cuadrados, introduciendo la idea de **mínimos cuadrados ponderados**. Esta variación del método implementa la idea que no todos los valores y_i son igualmente confiables, dado que el error asociado a cada uno de ellos, que denotaremos por σ_i asume un valor distinto, dando un mayor peso a los datos con menor error y viceversa. En particular, a cada dato y_i se le asocia un peso p_i, tal que ahora

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} p_i \left(y_i - f(x_i)\right)^2 . \tag{2.32}$$

Luego repetimos el mismo procedimiento utilizado por el método de mínimos cuadrados ordinarios visto anteriormente, minimizando la función χ^2. Esto conduce a nuevos valores de los parámetros de la función f que hayamos elegido como modelo.

Ajuste de un modelo lineal

En el caso de ajustar una recta, podemos obtener rápidamente las expresiones para la nueva pendiente y coeficiente de posición reemplazando en cada una de las expresiones encontradas en el caso del MMC ordinario las sumas $\sum_{i=1}^{N}$ por $\sum_{i=1}^{N} p_i$:

$$b_0 = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} p_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i y_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i\right)}{\left(\sum_{i=1}^{N} p_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i\right)^2}, \tag{2.33}$$

$$b_1 = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} p_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} p_i y_i\right)}{\left(\sum_{i=1}^{N} p_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} p_i x_i\right)^2}. \tag{2.34}$$

Ajuste polinomial

$$\begin{pmatrix} \sum p_i & \sum p_i x_i & \sum p_i x_i^2 & \cdots & \sum p_i x_i^m \\ \sum p_i x_i & \sum p_i x_i^2 & \sum p_i x_i^3 & \cdots & \sum p_i x_i^{m+1} \\ \sum p_i x_i^2 & \sum p_i x_i^3 & \sum p_i x_i^4 & \cdots & \sum p_i x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum p_i x_i^m & \sum p_i x_i^{m+1} & \sum p_i x_i^{m+2} & \cdots & \sum p_i x_i^{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum p_i y_i \\ \sum p_i x_i y_i \\ \sum p_i x_i^2 y_i \\ \vdots \\ \sum p_i x_i^m y_i \end{pmatrix}. \tag{2.35}$$

Notemos que no hemos dado una forma explícita para los pesos p_i y eso se debe a que no hay una única manera de definirlos. Por ejemplo, un buen criterio podría ser que los pesos sean inversamente proporcionales a la incertidumbre, es decir, le daríamos mayor credibilidad a los y_i con menos incertidumbre y menor credibilidad a los y_i con mayor incertidumbre. Para esto es común elegir $p_i = 1/(\Delta y_i)^2$. Una conveniente consecuencia adicional de esta elección es que la función χ^2 será siempre *adimensional*.

Ejemplo: Considere los datos de la siguiente tabla: Podemos comparar el resultado de ajustar

x	$y \pm \Delta y$
1.0	2.8 ± 0.3
2.0	3.3 ± 0.3
3.0	3.5 ± 0.5
4.0	3.5 ± 1.0
5.0	4.8 ± 0.3
6.0	4.2 ± 1.0

Tabla 2.2: Valores de x e y, con error en y.

una recta a estos datos usando el método de mínimos cuadrados tradicional (sin ponderar, es decir, sin tomar en cuenta los valores de Δy) y el método de mínimos cuadrados ponderado (eligiendo $p_i = 1/(\Delta y_i)^2$).

2.6. análisis (Gráfico e histograma) de residuos

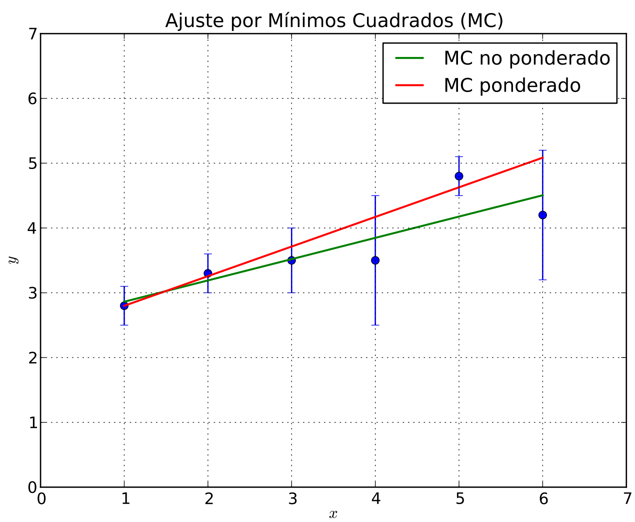

Figura 2.6: Ajuste por mínimos cuadrados con y sin poderación.

Capítulo 3

Desviación estándar de una función de varias variables

Supongamos que la magnitud del valor que queremos hallar, depende de las variables $x^1, x^2, \ldots, x^m$ mediante la relación funcional $y = f(x^\alpha)$, $\alpha = 1, \ldots, m$. Luego de realizar N medidas para cada una de las m variables, tenemos

$$\begin{array}{cccccc} x_1^1 & x_2^1 & \cdots & x_N^1 & ; & \bar{x}^1 \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_N^2 & ; & \bar{x}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & ; & \vdots \\ x_1^m & x_2^m & \cdots & x_N^m & ; & \bar{x}^m. \end{array}$$

Escribimos las desviaciones respecto al promedio como $\Delta x_i^1, \Delta x_i^2, \cdots \Delta x_i^m$, donde

$$\Delta x_i^1 := x_i^1 - \bar{x}^1, \qquad \Delta x_i^2 := x_i^2 - \bar{x}^2, \tag{3.1}$$

etc.

Las magnitudes determinadas indirectamente, estarán dadas por cada uno de los conjuntos de medidas mediante la relación funcional:

$$y_1 = f(x_1^1, x_1^2, \cdots, x_1^m), \tag{3.2}$$

$$\vdots = \quad \vdots \tag{3.3}$$

$$y_i = f(x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^m), \tag{3.4}$$

$$\vdots = \quad \vdots, \tag{3.5}$$

$$y_N = f(x_N^1, x_N^2, \cdots, x_N^m). \tag{3.6}$$

Desarrollando en serie de Taylor a primer orden en torno de los valores medios, podemos escribir:

$$y_i = f(x_i^1, x_i^2, \cdots, x_i^m) \tag{3.7}$$

$$\approx f(\bar{x}^1, \bar{x}^2, \cdots, \bar{x}^m) + \sum_{\alpha=1}^{m} \left.\frac{\partial f}{\partial x^\alpha}\right|_{\bar{x}^\alpha} (\Delta x_i^\alpha). \tag{3.8}$$

Las diferencias respecto al valor de la función evaluada en el promedio de cada conjunto de mediciones se pueden expresar como

$$\Delta y_i := y_i - f(\bar{x}^1, \cdots, \bar{x}^m) \tag{3.9}$$

$$\approx \sum_{\alpha=1}^{m} \left.\frac{\partial f}{\partial x^\alpha}\right|_{\bar{x}^\alpha} (\Delta x_i^\alpha). \tag{3.10}$$

Calculamos con esto la varianza (el cuadrado de la desviación estándar) de y:

$$\sigma_y^2 := \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{N-1} (\Delta y_i)^2 \tag{3.11}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \frac{1}{N-1} \left[\sum_{i=1}^{N} \left[\left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^1}\right|_{\bar{x}} \right)^2 (\Delta x_i^1)^2 + \cdots + \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^m}\right|_{\bar{x}} \right)^2 (\Delta x_i^m)^2 \right.\right. \\
&\quad + 2 \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^1}\right|_{\bar{x}} \right) \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^2}\right|_{\bar{x}} \right) (\Delta x_i^1)(\Delta x_i^2) + \cdots \\
&\quad \left.\left. +2 \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^{m-1}}\right|_{\bar{x}} \right) \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^m}\right|_{\bar{x}} \right) (\Delta x_i^{m-1})(\Delta x^m) \right]\right],
\end{aligned} \tag{3.12}$$

donde $\bar{x} = (\bar{x}^1, \cdots, \bar{x}^m)$.

Separamos esta última expresión en dos casos.

- Caso 1. Cuando las variables medidas están correlacionadas. Para este caso, la desviación estándar de los valores de y está dada por la raíz cuadrada de la expresión que se obtuvo.
- Caso 2. Cuando las variables medidas no están correlacionadas. En este caso, la suma de todos los términos cruzados son cero (o despreciable!), por lo que la expresión se reduce a

$$\sigma_y^2 \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} \left[\left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^1}\right|_{\bar{x}} \right)^2 (\Delta x_i^1)^2 + \cdots + \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^m}\right|_{\bar{x}} \right)^2 (\Delta x_i^m)^2 \right] \tag{3.13}$$

Una manera muy simple de visualizar que los términos cruzados no contribuyen al valor de σ_y^2, consiste en observar la figura 3, donde en cada eje se graficó una variable distinta. Las dos imágenes superiores, de la misma figura, son casos sin correlación entre las variables medidas y las dos figuras inferiores tienen una clara correlación. Luego, dividimos cada una de estas figuras en 4 cuadrantes. En todas las figuras el término cruzado $\sum_i (x_i^\alpha - \bar{x}^\alpha)(x_i^\beta - \bar{x}^\beta)$ (con $\alpha \neq \beta$) es positivo en los cuadrantes I y III y negativo en los cuadrantes II y IV. Para las dos figuras superiores, el número de medidas en cada uno de los cuadrantes son iguales, por lo que la suma total de los cuatro cuadrantes será igual a cero. Para las dos figuras inferiores, se ve claramente una correlación, es decir, si una de las variables crece la otra tiene una tendencia definida, dejando en evidencia que si hay dependencia entre estas y al dividir en 4 cuadrantes el número de medidas en los cuadrantes I y III no son iguales a las medidas de los cuadrantes II y IV, tal que la suma total no es cero.

La varianza de σ_y^2 de y puede entonces relacionarse con la varianza σ_α de cada varible independiente x_α por medio de la expresión

$$\sigma_y^2 \approx \sum_{\alpha=1}^{m} \left(\left.\frac{\partial f}{\partial x^\alpha}\right|_{\bar{x}} \right)^2 \sigma_\alpha^2. \tag{3.14}$$

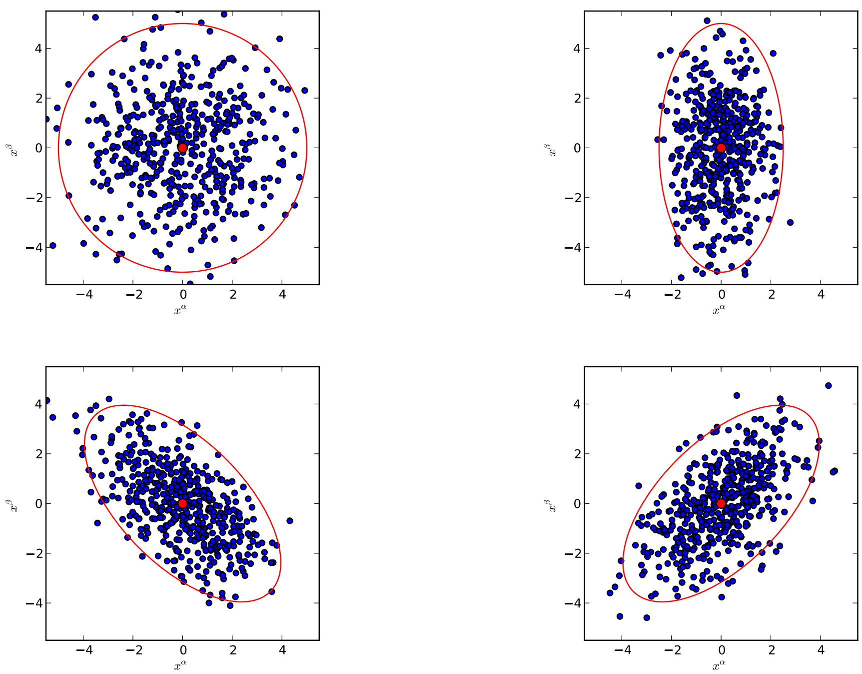

Figura 3.1: Distribuciones normales bivariadas.

3.1. Error en la determinación de parámetros usando MMC

Para encontrar la incerteza en la estimación de los parámetros b_0 y b_1 determinados por el MMC ponderado podemos usar el resultado de la sección 3. Cada punto de nuestros datos, caracterizados por el par (x_i, y_i) determina, junto con los errores Δy_i determinan los valores de el coeficiente de posición b_0 y la pendiente b_1 a través de las expresiones 2.33 y 2.34. Por lo tanto, podemos considerar a b_0 como una función particular de las N 'variables'y_i, donde cada uno de estos valores tiene un error Δy_i (estamos ignorando el posible error de x_i). Si cada uno de los errores Δy_i es la desviación estándar de muchos valores medidos para un correspondiente valor de x_i dado ($\Delta y_i = \sigma_i$), entonces podemos aplicar 3.14 para calcular la desviación estándar de b_0, usando

$$\sigma_{b_0}^2 \approx \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial b_0}{\partial y_i} \right)^2 \sigma_i^2. \tag{3.15}$$

A partir de 2.33 encontramos

$$\frac{\partial b_0}{\partial y_i} = \frac{1}{\Delta} \left(\frac{1}{\sigma_i^2} \sum_j \frac{x_j^2}{\sigma_j^2} - \frac{x_i}{\sigma_i^2} \sum_j \frac{x_j}{\sigma_j^2} \right) \tag{3.16}$$

$$\Delta := \left(\sum_i \frac{1}{\sigma_i^2} \right) \left(\sum_j \frac{x_j^2}{\sigma_j^2} \right) - \left(\sum_i \frac{x_i}{\sigma_i^2} \right)^2. \tag{3.17}$$

Con esto, luego de algo de álgebra, obtenemos

$$\sigma_{b_0}^2 \approx \frac{1}{\Delta} \sum_i \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}. \tag{3.18}$$

Análogamente, para la pendiente b_1, se encuentra

$$\sigma_{b_1}^2 \approx \frac{1}{\Delta} \sum_i \frac{1}{\sigma_i^2}. \tag{3.19}$$

Note que en el caso particular en que todos los errores σ_i son iguales ($\sigma_i = \sigma$) el MMC ponderado suministra los mismos valores para los coeficientes ajustados, y además

$$\sigma_{b_0}^2 \approx \frac{\sigma^2 \left(\sum_i x_i^2\right)}{N\left(\sum_i x_i^2\right) - \left(\sum_i x_i\right)^2}, \tag{3.20}$$

$$\sigma_{b_1}^2 \approx \frac{\sigma^2 N}{N\left(\sum_i x_i^2\right) - \left(\sum_i x_i\right)^2} \tag{3.21}$$

.

3.2. Algunos Teoremas

Ver https://en.wikipedia.org/wiki/Simple_linear_regression

Bibliografía

[1] Mohr *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1527 (2012) http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.84.1527.

[2] I.G. Hughes and T.P.A. Hase, *Measurements and their Uncertainties: A practical guide to modern error analysis*, Oxford University Press (2010).