

Ajuste de curvas

Uno de los objetivos del método científico es establecer la existencia de relaciones funcionales entre magnitudes, o sea definir las dependencias entre el valor de una magnitud y otra. A partir de esas relaciones, será posible predecir con algún grado de certidumbre el resultado de un experimento posterior. Eventualmente encontraremos una ley general que gobierna el proceso estudiado.

¿ Qué ventajas tiene realizar un ajuste de los datos experimentales ?

- si conocemos un modelo, verificamos su validez, y obtenemos los parámetros que describen un caso en particular.
- si no disponemos de un modelo, obtenemos una manera compacta de expresar el resultado de un conjunto de experimentos.

En ambos casos el ajuste obtenido permite utilizar una función conocida (f) para evaluar el valor de una magnitud (y) a partir del valor que toma otra magnitud (x).

$$[y=f(x)]$$

Supongamos que se han determinado los siguientes pares de valores numéricos correspondientes a dos magnitudes x e y , entre las cuales creemos que hay una relación “*unívoca*”. Para ello, hemos realizado mediciones en distintas condiciones; para cada valor de la magnitud x_i hemos obtenido el resultado y_i , con sus incertezas asociadas Δy_i , Δx_i . Los datos presentados a continuación corresponden a la temperatura (y_i en grados centígrados) de un volumen conocido de agua y al tiempo transcurrido (x_i , en segundos) desde que se la empieza a calentar.

| i | y_i | Δy_i | x_i (seg.) | Δx_i |
|-----|-------|--------------|--------------|--------------|
| 1 | 23 | 0.1 | 30 | 1 |
| 2 | 25.5 | 0.1 | 60 | 1 |
| 3 | 28.7 | 0.1 | 120 | 1 |
| 4 | 32.9 | 0.1 | 180 | 1 |
| 5 | 34 | 0.1 | 210 | 1 |
| 6 | 37 | 0.1 | 240 | 1 |

Notemos ahora que el subíndice i corresponde a situaciones experimentales distintas en las que ha variado al menos una de las magnitudes involucradas; por ejemplo, cada medición corresponde a las diferentes temperaturas a la que realizamos un experimento. Para cada estado del experimento (en el ejemplo, para cada temperatura) hemos repetido varias veces las mediciones, y determinado el promedio entre los valores obtenidos y las incertezas correspondientes a cada caso, y así obtenemos los valores x_i , y_i , Δx_i , Δy_i .

Puede suceder que la incerteza de alguna de las magnitudes se mantenga constante a lo largo del experimento. Si encontramos una argumentación que justifique tal comportamiento, es suficiente verificarlo para algunos puntos extremos y luego usar el mismo valor para todas las mediciones. Por ejemplo, realizando un

experimento en que medimos alguna variable como función del tiempo transcurrido, y asumimos que las condiciones en que se realiza tal determinación no dependen del momento en que se hagan, cada medición del tiempo tiene asociada la misma incerteza que las demás, resultando todos los Δt_i iguales.

En otros casos, convendrá tener en claro en qué rango de valores la incerteza porcentual de esa variable es menor, e intentar trabajar en ese rango.

Realicemos una representación gráfica de los valores obtenidos (figura ...). Cada punto corresponde a un par y_i x_i con sus incertezas Δy_i , Δx_i . La tendencia general indica una relación de proporción entre los valores de x_i y los de y_i .

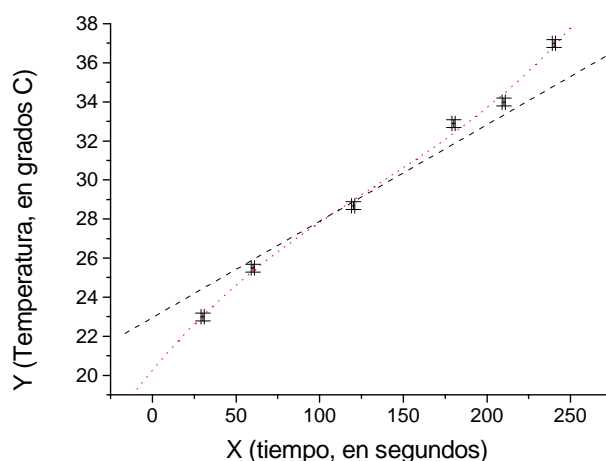


Figura 2.6: Gráfico de los datos experimentales con sus incertezas respectivas. En línea de puntos aparecen dos posibles funciones para describir el comportamiento medido: una recta y un polinomio de orden 4.

distintas formas funcionales

Nos preguntamos ahora si es posible obtener alguna forma funcional que describa el comportamiento de estos pares de valores. La relación entre dos magnitudes se expresa por medio de una función, por ejemplo un polinomio de grado 3 $y(x)=a+bx+cx^2+dx^3$, o alguna función trigonométrica $y(x)=a \text{ sen}(bx)$, o exponencial $y(x)=a e^{(-x/b)}$, etc. Cada una de estas formas funcionales describe un conjunto de curvas, dependiendo del valor que tomen cada uno de los parámetros a,b,c,\dots

Los criterios para la elección de una determinada forma funcional están relacionados con el MODELO cuya validez aceptamos o intentamos verificar.

Para una dada una forma funcional, nuestro objetivo es encontrar el conjunto de valores de a,b,c,\dots que describan la función que pase más cerca de todos los puntos experimentales de coordenadas (x_i,y_i) .

En principio, la forma funcional elegida, con algún valor de los parámetros a,b,c,\dots no pasará “justito” por todos los puntos experimentales. Las maneras de elegir la mejor curva de una dada familia pueden ser varias, en todos los casos buscaremos aquella que mejor se ajuste a los valores experimentales. Algunas propuestas pueden ser:

- exigir que la función pase por ciertos datos experimentales elegidos con algún criterio (por ejemplo aquellos que fueron obtenidos para los valores extremos de la

- magnitud x_i , o en condiciones más estables, etc. .;
- pedir que haya igual número de datos a cada lado de la curva;
- minimizar las diferencias entre los valores medidos y los calculados usando el modelo.

El último caso mencionado es el utilizado con mayor frecuencia, y lo desarrollaremos a continuación.

En el caso en que la dependencia sea una función lineal, $y=a+bx$, para cada valor x_i podemos obtener los valores de la magnitud “y” que predice el modelo como $y(x_i)=a+bx_i$. Este valor será en general un poco distinto al valor medido y_i . La distancia o diferencia entre el valor medido y el calculado por el modelo lineal es $y_i-y(x_i)$.

La suma de las distancias $(y_i-y(x_i))$ de todos los pares de valores $x_i y_i$ es una medida global de cuan buena o mala es nuestra elección de parámetros a y b. En efecto, $\chi = \sum (y_i-y(x_i))$ contiene las diferencias entre los valores medidos y los calculados con el modelo lineal en todo el rango de valores explorados en el experimento, y su valor parece un estimador apropiado de lo correcto de la función elegida: χ tendrá un valor pequeño solamente cuando todas las contribuciones $(y_i-y(x_i))$ sean pequeñas.

Notemos que $(y_i-y(x_i))$ puede tomar tanto valores positivos como negativos. Para evitar posibles cancelaciones entre distancias positivas y negativas, sumamos los cuadrados de dichas distancias: $\chi^2 = \sum (y_i-y(x_i))^2$.

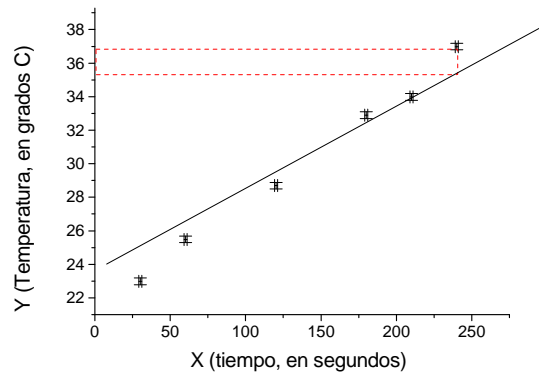


Figura 2.7: El método de cuadrados mínimos: se minimiza la suma de diferencias al cuadrado entre cada valor experimental y el obtenido por cálculo para el mismo valor de la abcisa.

El método de cuadrados mínimos proporciona los valores de a y b que hacen que esta suma sea mínima:

$$a = [(\sum y_i)(\sum x_i^2) - (\sum x_i)(\sum x_i y_i)] / [N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2]$$

$$b = [N(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)] / [N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2]$$

en donde las sumas se extienden a los N pares de valores. Estos valores de a y b se obtienen por derivación de la expresión de χ^2 pues estamos buscando las condiciones para que tome el menor valor posible; sugerimos hacer esta deducción como ejercicio de aplicación. Por lo tanto, a partir de los pares de valores

el método de los cuadrados mínimos

Obtenemos los coeficientes a y b

experimentales x_i e y_i podemos calcular los parámetros de la función lineal que minimiza la suma de distancias entre los valores experimentales y los que se obtienen al evaluar dicha función para la misma abscisa x_i .

Usando los datos de la tabla, podemos calcular.... (sumas parciales)

$$(\sum y_i)=181.1 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$(\sum x_i)=840 \text{ seg}$$

$$(\sum x_i^2)=153000 \text{ seg}^2$$

$$(\sum x_i y_i)=27606 \text{ } ^\circ\text{Cseg}$$

$$(\sum y_i^2)=5610.35 \text{ } ^\circ\text{C}^2$$

$$(N(\sum x_i^2)-(\sum x_i)^2)=6 \times 153000-(153000)^2=212400 \text{ seg}^2$$

y finalmente obtener $a=21.27 \text{ } ^\circ\text{C}$, $b=0.0636 \text{ } ^\circ\text{C/seg}$.

¿Entendemos cuáles son las unidades de a y b ? Dado que " a " es el valor que toma la función y cuando $x=0$, es claro que sus unidades son las mismas que las de y . Esto se suele representar así: $[a]=[y]$. Por un análisis similar encontramos que las unidades de " b " corresponden a los de la variable y divididos por los de la variable x , o sea $[b]=[y]/[x]$.

Podemos obtener una medida de la calidad del ajuste a partir del valor del coeficiente de correlación

$$r = \frac{[N(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)]}{[(N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2)(N(\sum y_i^2) - (\sum y_i)^2)]^{1/2}}$$

Valores cercanos a "1" corresponden a un buen ajuste mientras que valores cercanos a "0" indican una ausencia de correlación entre las dos magnitudes. Debemos ser críticos al evaluar la bondad del ajuste: podemos aplicar el método de cuadrados mínimos a ciegas, y el resultado obtenido será simplemente un reflejo de esa "ceguera". Asimismo, debemos tener en claro si lo que queremos es verificar la validez de un modelo, o si el objetivo buscado es describir los datos experimentales con una función arbitraria. Para el caso considerado, obtenemos $r = 13512 / [(212400 \times 864.89)]^{1/2} = 13512 / 13553.69 = 0.99692$ lo cual corresponde a un ajuste lineal bueno, aunque no excelente.

Usando la forma funcional con los parámetros a y b ya evaluados, podemos calcular los valores que predice el modelo para nuestros datos:

- en el mismo rango de medición de los datos usados para obtener el ajuste;
- extrapolar fuera de dicho rango; en este caso debemos tener un poco de cuidado, pues puede suceder que si bien en un dado rango la relación entre las magnitudes x e y se puede describir como lineal, fuera de dicho rango (para valores mucho más grandes o más chicos que los usados) la descripción lineal pierda validez.

En el ejemplo dado, podemos preguntarnos cuál era la temperatura a los 100 segundos de comenzar a calentar. Usando los valores $a=21.27 \text{ } ^\circ\text{C}$, $b=0.0636 \text{ } ^\circ\text{C/seg}$ obtenemos $y(100 \text{ seg})=21.27 \text{ } ^\circ\text{C} + 0.0636 \text{ } ^\circ\text{C/seg} \times 100 \text{ seg}=27.63 \text{ } ^\circ\text{C}$.

En este ejemplo resulta claro que no es posible extrapolar la dependencia lineal obtenida a un rango de tiempos mayor que 1200 segundos. ¿Por qué?

Sugerencia!

Utilizando programas de graficación o lenguajes accesibles de programación es posible crear rutinas que realicen los cálculos mencionados.

Verificar los valores numéricos de a, b y r obtenidos en el ejemplo del texto mediante el uso de alguno de éstos programas.



la incerteza en el resultado de los ajustes...

Ahora bien, ¿con qué precisión obtuvimos el par de valores a y b que ajustan los resultados experimentales? A partir del conocimiento de las incertezas correspondientes a los valores x_i e y_i , nos preguntamos por la manera en que éstos influyen en los parámetros del ajuste. Dicho de otra manera, nos proponemos estimar Δa y σ_b .

otra manera de hacer el ajuste...

A continuación proponemos dos métodos sencillos para realizar estas estimaciones, pudiendo encontrarse métodos más sofisticados en ref[bevington]. El primer método consiste en plantearnos que podríamos haber realizado el ajuste de cuadrados mínimos tomando los valores de y_i como x_i y viceversa. Este cambio en la manera de mirar los datos no debería tener influencia en el resultado final. Sin embargo, haciendo los cambios de variable y despejes apropiados, obtendremos otro par de valores a' y b' , que serán distintos a los obtenidos previamente. ¿Por qué sucede esto? Mirando la figura 2, notamos que la cantidad a minimizar al intercambiar las variables es la suma de las distancias horizontales entre los datos y la función lineal, y ésta es en general distinta que la suma de las distancias verticales. Por lo tanto, las dos maneras de resolver el problema del mejor ajuste son correctas! Las diferencias entre a y a' y entre b y b' nos permiten tener una buena estimación de las incertezas en el ajuste.

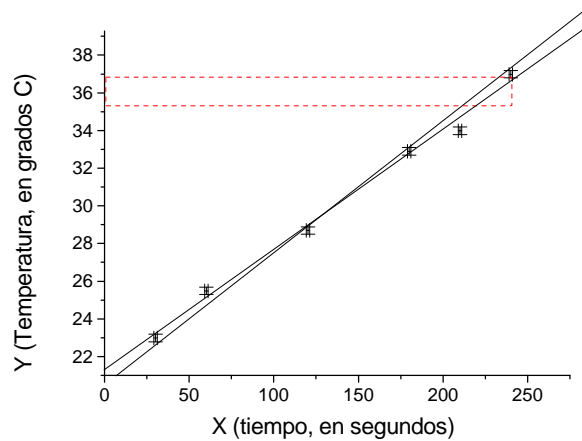


Figura 2.8: Rectas extremas que podrían describir los datos experimentales.

Otra manera de realizar la estimación de Δa y Δb es obtener por cálculo directo los parámetros de dos rectas extremas de pendientes máxima y mínima que pudieran ajustar los datos obtenidos. Al comparar estos valores de a y b con los obtenidos por el método de cuadrados mínimos, obtenemos una cota máxima para Δa y Δb .

Ejemplo de aplicación:

Usando la ecuación de una recta que pasa por dos puntos conocidos (x_1, y_1) y

por cálculo directo

(x_2, y_2) ,
 $(x-x_1)/(x_2-x_1) = (y-y_1)/(y_2-y_1)$ obtener los valores de a_{\max} y b_{\max} para la recta que pasa por los puntos $A=(x_{\max}, y+\Delta y)$ y $B=(x_{\min}, y-\Delta y)$. Comparar con los obtenidos por el método de la minimización y estimar Δb como $\Delta b \cong (b - b_{\max})$.

Podemos aplicar cuadrados mínimos a otras funciones!

Si bien el método de cuadrados mínimos presentado se aplica a una función lineal, realizando cambios de variable apropiados (que permiten linealizar las expresiones) podemos usarlo para ajustar otras relaciones funcionales:

$$y=A+(B/x) \quad \rightarrow y'=y, x'=1/x, a'=A, b'=B.$$

$$y=Ae^{(Bx)} \quad \rightarrow \log y = \log A + Bx ; y'=\log y, a'=\log A, b'=B, x'=x.$$

$$y=Ax^n \quad \rightarrow \log y = \log A + n \log x ; y'=\log y, a'=\log A, b'=n, x'=\log x.$$

Ajuste de curvas con otras funciones

Por otra parte, el método de minimización de $\Sigma \chi^2 = \Sigma (y_i - y(x_i))^2$ es general, y no es difícil deducir las expresiones para calcular los coeficientes a, b, c, \dots para cualquier otra función. Esto se obtiene derivando la expresión de $\Sigma \chi^2$ con respecto a cada uno de los parámetros y resolviendo el sistema de ecuaciones que así se obtiene.

En definitiva, es este capítulo hemos presentado las motivaciones para realizar una cuidadosa medición, e introdujimos herramientas para llevar adelante un análisis de los resultados obtenidos.