Origin: Ajuste no lineal (parte II)

Vamos a buscar los parámetros que mejor describen los datos experimentales proponiendo una función de la forma:

 $y = y_0 + A e^{-R_1 x} \cos(w x + R_2)$

Necesitamos tener a mano los resultados que obtuvimos del ajuste de la envolvente. Yo había usado una función predefinida en Origin para ajustar los "picos": Analysis > Fitting > Nonlinear Curve Fit Category: Exponential Function: Exponential

 $y = y_0 + A \ e^{R_0 x}$

$$\begin{split} y_0 &= (70, 15 \pm 0, 03) \text{ cm} \\ A &= (27, 89 \pm 0, 09) \text{ cm} \\ R_0 &= (-0, 286 \pm 0, 002) \text{ s}^{-1} \\ \text{Y además estimar la frecuencia angular} \quad \omega = \frac{2\pi}{T} \\ \text{w } \approx \text{ 6,73 en este ejemplo.} \end{split}$$

(Actualizado: 21/05/2020)



Mónica Agüero

Ir a Analysis > Fitting > Nonlinear Curve Fit > Open Dialog

III NLFit ()	- 🗆 🗙		
Dialog Theme	<u>•</u>		
Settings Code Parameters Bounds Function Selection Data Selection Fitted Curves Advanced Dutput Function File Name Function is empty. Please specify it to continue.	Origin Basic Functions Exponential Growth/Sigmoidal Hyperbola Lyperbola Power Rational Waveform Chromatography Electrophysiology Pharmacology Statistics Quick Fit User Defined	<pre>Ir a Category > User Defined</pre>	
Invalid input found! Please correct it to continue fitting.		NLFit () Dialog Theme Settings Code Parameters Bounds Function Data Selection Fitted Curves Advanced Dutput Category User Defined ~ Function Description File Name[.FDF]	- · ×
Hacer clic poder defin	sobre este ícono para nir la función.	Function is empty. Please specify it to continue. Fit Curve Residual Formula Sample Curve Me Create New Fitting Function	Fit Done Cancel

Se abre la siguiente ventana:

Fitting Function Builder - Name and Type - NewFunction - X Hints Function Type Select or create a Category User Defined New	1- Apretar <mark>New</mark> para crear una nueva categoría. Yo lo llamé Amortiguado
Select this option for simple fitting dependent variable. Function Name NewFunction The function body is limited to one expression, and you need to provide only the right hand side of the equation. Description This option provides faster performance than Origin C. Expression Origin C Description ••••••••••••••••••••••••••••••••••••	2- Luego asignar un nombre a la función. Yo lo llamé Amor1.
○ External DLL-based Function	Fitting Function Builder - Name and Type - Amortiguado - × Hints - × Function Type Select or create a Category Amortiguado Select this option for simple fitting functions that have only one dependent variable. >> The function body is limited to one Description
Cancel Ca	expression, and you need to provide only the right hand side of the equation. Function Type This option provides faster performance than Origin C. Expression Example: Origin C a + b * exp(-x^c / d) Origin C External DLL-based Function
Aquí se muestra como queda luego —— de completar los pasos 1 y 2.	Cancel Cancel Cancel Al final apretar

3

el botón Next.

Se abre la ventana:

tting Function Builder - Variables and Parame	eters - Amor1		- 🗆 X					
Hints Inter names of variables, parameters, inter names of variables, parameters, inter names using comma. Image: Im	Independent Variables Dependent Variables Parameters Derived Parameters Constants	x y A,w,R1,y0,R2 Peak Function		•	Definir los dependiente parámetros.	nombres de la , independiente	is variat e y de	oles los
Peak Function	Cancel	<< Back	k Next >> Finish	Al el	final apreta botón <mark>Next</mark> .	r		

Tenemos que tener en claro cuál es la función que vamos a escribir. En este caso la función es:

$$y = y_0 + A e^{-R_1 x} \cos(w x + R_2)$$

$$parámetros$$

y: variable dependiente
x: variable independiente

Se abre la ventana:

ession Function -	Amor1 – D	$^{ imes}$ Para poder realizar el ajuste es
····· • >>	Parameters Constants	<u>indispensable</u> estimar los parámetros iniciales (que tienen
alues alues e strol alog	Param Unit Meaning Fixed Initial Value Significant Digits A ? ✓ 27,89 System w ? ✓ 6,73 System R1 ? ✓ 0,286 System y0 ? ✓ 70,15 System R2 ? ✓ 0 System	que ser cercanos a los valores "reales"). Ver diapositiva 1. Notar que está marcada la opción Fixed en todos los parámetros.
an be ssion . The npty if	Function Body y= y0 + A*exp(-R1*x)*cos(w*x+R2)	Escribir la función. Aquí dice y0 + A*exp(-R1*x)*cos(w*x+R2)
ie line,	Quick Check x = 1 Image: Cancel Cancel	No olvidar los paréntesis y signos de multiplicación, segúr corresponda.

Luego de completar la información de esta ventana apretar el botón Finish.

Luego de apretar el botón Finish se abre la siguiente ventana:

En rojo vemos el dibujo de la curva de ajuste con los parámetros que definimos en la diapositiva anterior.



Hacer clic sobre la solapa Parameters.

Desmarcar la opción Fixed de alguno de los parámetros así se lo deja libre para que, en cada iteración, se encuentre el valor que mejor describe los datos experimentales. Luego apretar el botón (1 iteración) ó (varias iteraciones hasta que converja).









Resultado final. Reportar los parámetros con las cifras significativas apropiadas y con las unidades que correspondan.

$$y = y_0 + A e^{-R_1 x} \cos(w x + R_2)$$

 $y_0 = (70, 24 \pm 0, 01) \text{ cm}$ $A = (27, 57 \pm 0, 06) \text{ cm}$ $R_1 = (0, 287 \pm 0, 001) \text{ s}^{-1}$ $w = (6, 6848 \pm 0, 0009) \text{ rad/s}$ $R_2 = (-0, 515 \pm 0, 002) \text{ rad}$