SciDAVis: Parte III

Contenido: Procesamiento de datos, ajustes no lineales.

A continuación se verá una de las distintas formas posibles de hacer un ajuste gaussiano a partir de un histograma.



Queremos saber cuántos datos hay en cada columna del histograma. Para eso hacemos doble click en las columnas del gráfico para abrir la ventana **Detalles del Gráfico** y hacemos click en **Mostrar estadísticas**

| Detalles del gráfico Image: Capa1 Image: Capa2 Image: Capa2 Image: Capa2 Image: Capa2 < | ⊠ Gráfico1 | |
|--|--|--|
| Image: Seráfico1 Ejes Patrón Espaciado Datos del histograma Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfico1 Image: Seráfic01 Image: Seráfic01 <t< td=""><td>Toetalles del gráfico</td><td>2 X</td></t<> | Toetalles del gráfico | 2 X |
| Tamaño de Bin 0.0714 Empezar 1.4372 Fin 2.2228 Tipo de gráfico Histograma • >> Tabla OK Cancelar Aplicar Asociaciones de gráficos | ▲ Sráfico1 ▲ □ Capa1 ☑ Tabla1: dummy(X),1(Y) | Ejes Patrón Espaciado Datos del histograma Binning Automático Mostrar estadísticas |
| Tipo de gráfico Histograma Tabla OK Cancelar Aplicar Asociaciones de gráficos | | Tamaño de Bin 0.0714 Empezar 1.4372 Fin 2.2228 |
| | Tipo de gráfico Histograma 🔹 | >> Tabla OK Cancelar Aplicar Asociaciones de gráficos |
| | 0 | 5 16 17 18 19 2 21 22 |
| | | Tiempo (s) |

Aparecerá una Hoja de resultados y una nueva tabla con información útil

| SciDAVis - C:\Users\constanza\Desktop\Datos laboratorio\h | iistograma para ajuste gaussiano.scipr | j - [Bi | ns1] | | x | | | |
|---|--|---------------|----------------------|-----------------|----------|--|--|--|
| Archivo Editar Ver Programación Gráfico Análisis Tabla Ventana Ayuda | | | | | | | | |
| ▋▋▙₢₲₻₩₩₽₽₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩₩ | [문 Al:] 역 역 점 우 후 후] · ᄼ 바 버 ♥ 8 | | | + []Σ [] | | | | |
| Hoja de resultados | | | | | ē × | | | |
| 17/4/20 21:29:35Histograma y probabilidades para Tabla1_1 Media = 1.80134 Desvío estándar = 0.108987 Mínimo = 0 Máximo = 46 Bins = 12 | | | | | | | | |
| Bins[X] ⊕Cantidad[⊕Suma[Y] ⊕Porcentaje | | | Descripción Tipo | o Fórmula | | | | |
| 1,4372 0 0 0 1,5086 0 0 0 | | | Ар | olicar | | | | |
| -1.50 10 0 -4 1.6514 38 54 27 -1.7228 46 100 50 | | | Tipo: | Numérico | - | | | |
| n 1,7942 39 139 69,5 / 1,8656 36 175 87.5 | | | Formato: | Automático (e) | • | | | |
| × 1,937 21 196 98 ✓ 2,0084 4 200 100 | | | Digitos decimales: 6 | ; | • | | | |
| 4 200 100 11 2,0798 0 200 100 12 2,1512 0 200 100 12 2,2226 0 200 100 | | | | | | | | |
| Explorador de proyecto | | 1 | | | ē × | | | |
| 🔊 histograma para ajuste gaussiano | Nombre Tipo Ver | Crea | ado Etiqueta | | ^ | | | |
| | Iabla Iabla Oculto Image: Second state Image: Second state | 17/4) 17/4 | /20 Estadísticas de | filas de labla1 | Ξ | | | |
| 1 | Bins1 Tabla Maximiz | . 17/4 | /20 | | - | | | |
| | | | | | | | | |

Para quitar la tabla del modo de pantalla completa podemos hacer doble click en ella en el explorador de proyecto (que se abre desde **Ver** -> **Explorador de proyecto**).



| | ⊞Bins[X] | ⊞Cantidad[Y] | BSuma[Y] | |
|----|----------|--------------|----------|------|
| 1 | 1,4372 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 1,5086 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 1,58 | 16 | 16 | 8 |
| 4 | 1,6514 | 38 | 54 | 27 |
| 5 | 1,7228 | 46 | 100 | 50 |
| 6 | 1,7942 | 39 | 139 | 69,5 |
| 7 | 1,8656 | 36 | 175 | 87,5 |
| 8 | 1,937 | 21 | 196 | 98 |
| 9 | 2,0084 | 4 | 200 | 100 |
| 10 | 2,0798 | 0 | 200 | 100 |
| 11 | 2,1512 | 0 | 200 | 100 |
| 12 | 2,2226 | 0 | 200 | 100 |

La columna **Bins** nos da el valor en el que comienza cada uno de los 12 bins (o barras) del histograma

La columna **Cantidad** nos dice cuántos datos hay en esae bin.

La columna **Suma** va contando la cantidad de datos hasta ese bin (por eso al final vale N, la cantidad total de datos).

La columna **Porcentaje** nos da el porcentaje respecto al total correspondiente a esa suma.

Para hacer nuestro ajuste nos va a interesar graficar la cantidad de datos de cada bin (o sea la columna **Cantidad**) en función del centro de ese bin.

Pero en la columna **Bins** no tenemos el centro, sino el comienzo de cada bin. Para obtener el centro deberíamos tomar ese valor y sumarle la mitad del ancho del bin, en este caso: 0,0714 / 2 = 0,0357

Podemos hacer ese cálculo automáticamente de la siguiente manera:

| 5 | | Bins1 | | | | |
|-----|----|----------|------------------|---------------------|-------------------------------|------------|
| nat | | ⊞Bins[X] | B Cantida | | Gráfico | • |
| :05 | 1 | 1,4372 | 0 | | Setear Columna(s) Como | • |
|) d | 2 | 1,5086 | 0 | | Llenar la selección con | • |
| re | 3 | 1,58 | 16 | | Insertar columna(s) vacía(s) | |
| np | 4 | 1,6514 | 38 | | Remover Columnas | |
| | 5 | 1,7228 | 46 | Z | Limpiar Columnas | |
| | 6 | 1,7942 | 39 | + | Agregar Columnas | |
| | 7 | 1,8656 | 36 | | Normalizar la(s) Columna(s) | |
| | 8 | 1,937 | 21 | ☐⊅ Ordenar Columnas | | |
| | 9 | 2,0084 | 4 | | Editar Descripción de Columna | |
| | 10 | 2,0798 | 0 | | Cambiar Tipo y Formato | Ctrl+Alt+O |
| | 11 | 2,1512 | 0 | = | Mostrar Comentarios | |
| | 12 | 2,2226 | 0 | ΣI | Estadística de Columna | |

Seleccionamos la columna Cantidad y haciendo click derecho seleccionamos la opción Insertar columna vacía

De esa forma obtenemos una nueva columna vacía justo antes de **Cantidad**

| s[X] | BCentro[Y | ⊞Cantidad[` | ⊞Suma[Y] | | Descripción Tipo Fórmula |
|------|-----------|-------------|----------|------|--------------------------|
| 2 | | 0 | 0 | 0 | Aplicar |
| 6 | | 0 | 0 | 0 | |
| | | 16 | 16 | 8 | Nombre: Centro |
| 4 | | 38 | 54 | 27 | Comentario: |
| 8 | | 46 | 100 | 50 | |
| 2 | | 39 | 139 | 69,5 | |
| 6 | | 36 | 175 | 87,5 | |
| | | 21 | 196 | 98 | |
| 4 | | 4 | 200 | 100 | |
| 8 | | 0 | 200 | 100 | |
| 2 | | 0 | 200 | 100 | |
| 6 | | 0 | 200 | 100 | |
| | | | | | |

Haciendo doble click sobre el título de la columna podemos editar sus propiedades en las pestañas de la derecha. Podemos por ejemplo cambiarle el nombre a **Centro** Ahora vamos a la pestaña **Fórmula**, escribimos "col(Bins) + 0.0357" y clickeamos **Aplicar**. Esto hará que cada fila de la columna **Centro** valga lo mismo que esa fila de la columna **Bins** + 0.0357

| ■ | Bins1 | | | | | | | - | × |
|----|----------|-----------|------------|------------------------|-------------|---------------|------|---------------------------|---|
| | ⊞Bins[X] | BCentro[Y | ⊞Cantidad[| <mark>⊞Suma[</mark> Y] | ⊞Porcentaj€ | Descripción | Tipo | Fórmula | |
| 1 | 1,4372 | 1,4729 | 0 | 0 | 0 | Fórmula: | | Aplicar | |
| 2 | 1,5086 | 1,5443 | 0 | 0 | 0 | | 257 | o final monosologica in a | |
| 3 | 1,58 | 1,6157 | 16 | 16 | 8 | col(Bins)+0.0 | 35/ | | |
| 4 | 1,6514 | 1,6871 | 38 | 54 | 27 | | | | |
| 5 | 1,7228 | 1,7585 | 46 | 100 | 50 | | | | |
| 6 | 1,7942 | 1,8299 | 39 | 139 | 69,5 | | | | |
| 7 | 1,8656 | 1,9013 | 36 | 175 | 87,5 | | | | |
| 8 | 1,937 | 1,9727 | 21 | 196 | 98 | | | | |
| 9 | 2,0084 | 2,0441 | 4 | 200 | 100 | | | | |
| 10 | 2,0798 | 2,1155 | 0 | 200 | 100 | | | | |
| 11 | 2,1512 | 2,1869 | 0 | 200 | 100 | | | | |
| 12 | 2,2226 | 2,2583 | 0 | 200 | 100 | | | | |

Ahora sí tenemos todo lo necesarios para graficar la cantidad de datos en función del centro del bin, pero antes de hacerlo necesitamos setear correctamente la columna **Centro** como **X** y la columna **Cantidad** como **Y**.



1.8299

39

139

Para graficar seleccionamos las dos columnas y vamos a Gráfico -> Símbolos

| | | eski | top | Dato | S Id | | iistograma para | a ajuste gaussiai | io.scipi |
|----------------|-----|--------------------------|--------------------------|----------------------------------|----------------|------------|--------------------|-------------------|----------|
| ión [| Grá | ifico | An | álisis | Tab | la Ventana | Ayuda | | |
| 2 🗄 | / | Lín | ea | | | | ₩ Q Q ₩ | | 🖬 😌 E |
| 点 2 | | Sím | nbolo | DS | | | | | |
| oba | 1 | Lín Lír | ea + nea/ | - Símbo Símbo | oolo lo e | special 🕨 | | | |
| = (Bir | | Bar Are Por Vec | rras ras a cion | vertio horizo es es XYX | cales ontal | es | | | ráfico1 |
| | N | Vec Grá | tore fico | s XYA | M dísti | cos • | ∎Centro[X2] | ∎Cantidad[Y2] | ⊞Suma |
| | | Par | nel | | | • | 1,4729 | 0 | 0 |
| | _ | Grá | áfico | 3D | 4 | + | 1,5443 | 0 | 0 |
| | | | | For | 3 | 1,58 | 1,6157 | 16 | 16 |
| | | | | Dig | 4 | 1,6514 | 1,6871 | 38 | 54 |
| | | | | Tin | 5 | 1,7228 | 1,7585 | 46 | 100 |
| | | | | Pre | 6 | 1,7942 | 1,8299 | 39 | 139 |
| | | | | val Eje | 7 | 1,8656 | 1,9013 | 36 | 175 |
| | | | | | 8 | 1,937 | 1,9727 | 21 | 196 |
| | | | | | 9 | 2,0084 | 2,0441 | 4 | 200 |
| | | | | | 10 | 2,0798 | 2,1155 | 0 | 200 |
| | | | | | 11 | 2,1512 | 2,1869 | 0 | 200 |
| | | - | | | 12 | 2,2226 | 2,2583 | 0 | 200 |

Podemos volver a emprolijar el gráfico como se explicó en el tutorial SciDAVis - Parte II



9

Vamos a realizar un ajuste gaussiano sobre ese gráfico. Para eso vamos a **Análisis** -> **Asistente de ajuste**. Se abrirá una ventana con opciones

| .03 1000 | natono | Instogra | ina para | ajuste | gaassia | 10.50 |
|----------|-----------------|------------------------|----------|------------|---------|-------|
| nientas | Análisis | Formato | Ventana | Ayuda | | |
| D | Tradu | ucir | | • | * 🖬 | - |
| | Deriv Integ | ar Irar | | | | |
| | Suav Filtro | izar FFT | | > > | | |
| | Inter FFT | polar | | | | |
| | Ajust Asiste | e rápido ente de aj | uste C | ، trl+Y | | |
| ad[Y2] | ⊞Suma[` | Y2] ⊞P | Descri | ipción | Tipo | F |
| | 0 | | Gráfico4 | | | |
| | 0 | | Jiancor | | | |

| Categoría | Función | Expresión | |
|---|--|--------------------------|------------------------|
| Definida por el usuario Incorporada Básico Plugins | abs() acos() asin() asin() asinh() atan() atanh() avg(,) beccel in() | abs(x): Absolute valu | ue of x. |
| Nombre usuario1 | | | Guardar Borrar capa |
| | | | Agregar expresión |
| | | | Agregar nombre |
| | | | Reiniciar |
| | | | Cerrar |
| | | | |

Λ

Aquí debemos seleccionar la ecuación del tipo de curva con el que queremos ajustar. En nuestro caso vamos a **Incorporada** y seleccionamos **GaussAmp**, que corresponde a la expresión de la derecha. Luego tocamos el botón **Ajustar** >>

| Categoría | Función | Expresión | | |
|---|--|-----------|-------------------|------------------------------|
| Definida por el usuario Incorporada Básico Plugins | Boltzmann ExpGrowth ExpDecay1 ExpDecay2 ExpDecay3 GaussAmp Gauss | xc)/(2*w | $y = y_0$ | $+A.e^{\frac{-(x-x)}{2w^2}}$ |
| Ajustar usando función in Nombre GaussAmp | corporada | | Guardar | |
| Parámetros y0, A, xc, w | | | Borrar capa | |
| y0+A*exp(-(x-xc)*(x-xc)/(2*v | v*w)) | | Agregar expresión | |
| | | | Agregar nombre | |
| | | | Reiniciar | |
| | | | Cerrar | |
| | | | | |

En esta ventana podemos ver cuales son los parámetros que se ajustarán y detalles del método utilizado. Por medio de algoritmos internos, el programa encontrará los valores de estos parámetros que dan la curva que mejor se corresponde con los datos experimentales del gráfico

| Curva | | Bins1_Cantidad | | | | • |
|-------------------------|-----------|----------------------|---------------|--------|-------------|--------|
| Función | | GaussAmp (x, y0, A, | xc, w) | | | |
| | | y0+A*exp(-(x-xc)*(x | -xc)/(2*w*w)) | | | |
| | | Parámetro | | Valor | | |
| | | yO | | | 1,000000000 | 000000 |
| Conjeturas | iniciales | Α | | | 1,000000000 | 000000 |
| | | хс | | | 1,000000000 | 000000 |
| Algoritmo | | w | | | 1,000000000 | 000000 |
| | | Levenberg-Marquard | t escalado | | | • |
| Color | | * | | | | |
| Des <mark>d</mark> e x= | 1,4729 | | Iteraciones | s 1000 | | ▲ ▼ |
| A x= | 2,2583 | | Tolerancia | 1e-4 | | |
| Fuente de | error Y | Errores desconocidos | • Bins1 | | - Bins | * |

Obtenemos esta curva de color rojo. Podemos nuevamente clickear la curva para configurar su color, grosor, etc. y hacer doble click en la leyenda para editarla.



Los datos del ajuste aparecen en la Hoja de resultados, en la parte superior de la pantalla.

| D 🕞 🛎 📸 🔚 🖬 🗳 🏂 🔯 🗃 A | D 🔁 🚱 🙀 🕰 🍳 🥰 🔅 🔶 🕈 🗰 🖝 📾 🐨 💩 🜩 🏕 🖉 🖉 🖾 🐁 |
|--|---|
| ▋└─────────────────── | |
| Hoja de resultados | |
| [18/4/20 00:06:02 Gráfico: ""] Ajuste GaussAmp ajuste del conjunto de datos: Bins1_Ca errores estándar Y: Desconocido Levenberg-Marquardt escalado algoritmo con tolerancia = Desde x = 1,4729 a x = 2,2583 y0 (offset) = -2,41084482150724 +/- 2,5621117057082 A (altura) = 49,2201351674551 +/- 3,32479435020676 xc (centro) = 1,79602737203628 +/- 0,0085149066775007 w (anchura) = 0,13291334183267 +/- 0,01260806559772 | ntidad, usando función : y0+A*exp(-(x-xc)^2/(2*w^2)) = 0,0001 Parámetros del ajuste con sus incertezas |
| Chi^2 = 131,068607527091 R^2 = 0,965110397286489 | |
| Iteraciones = 32 Estado = success | |
| Tabla1 - C:/Users/constanza/Desktop/Datos laborate #1[X] 1.6 1.94 1.85 4.1,78 1.72 1.97 1.72 1.97 1.72 1.97 1.72 1.97 2.06 | ripción Tipo Fórmu Numérico Aplicar Numérico ato: Automático (ss decimales: 6 de columna seleccionado: sión doble |

Para reportar estos resultados en un informe deberíamos exportar los gráficos como imágenes e incluir un epígrafe que los describa y reportar los valores e incertezas de los parámetros ajustados en una tabla o en el texto, con sus unidades correspondientes.

