

## Apéndice D

### Método de cuadrados mínimos – Caso no lineal

En este apéndice extendemos la discusión de cuadrados mínimos, iniciada en el Cap.7, al caso de relaciones no lineales. Discutimos brevemente cómo realizar simulaciones usando la técnica de Montecarlo.

#### Objetivos

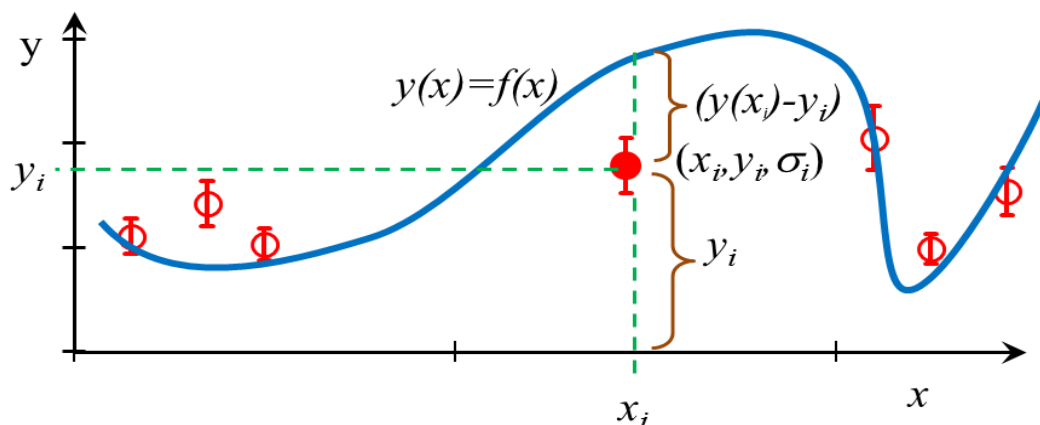
- ✓ Ajuste de parámetros en casos no lineales
- ✓ Simulación usando el método de Montecarlo

#### D.1 Método de cuadrados mínimos en relaciones no lineales

Supongamos que tomamos una serie de mediciones de dos magnitudes cuya relación deseamos determinar. El resultado de nuestras  $N$  mediciones dará lugar a un conjunto de  $N$  ternas de la forma  $(x_i, y_i, \sigma_i)$ , donde  $\sigma_i$  es la incertidumbre asociada a la determinación de  $y_i$ . Aquí suponemos que la incertidumbre de  $x_i$  es despreciable. Supongamos asimismo que el modelo que ajusta los datos viene dado por la función  $f(x; a, b, c, \dots)$ , donde  $a, b, c$ , etc. son los  $n_{par}$  parámetros del modelo. Al estimador del valor de  $y$  dado por el modelo lo designamos por  $y(x_i) = f(x_i; a, b, c, \dots)$ . Decimos que  $y(x_i)$  representa la variación determinista de  $y$  con  $x$ .

En este caso definimos la **función chi cuadrado** como:<sup>1</sup>

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - y(x_i))^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^N w_i \cdot (y_i - y(x_i))^2, \quad (D.1)$$



**Figura D.1** Ejemplo de modelo no lineal representado por la función  $f(x)$ . El resultado de las mediciones es la terna  $(x_i, y_i, \sigma_i)$ .  $\sigma_i$  representa el error absoluto asociado a cada observación  $y_i$ .  $y(x_i)$  es la predicción del modelo para el valor de  $x_i$ .

donde los valores  $w_i$  son los *factores de peso* de cada tríada de datos  $(x_i, y_i, \sigma_i)$ ; en este caso  $w_i = 1/\sigma_i^2$ . Definimos el número de grados de libertad,  $\nu$ , del modelo como:

$$\nu = N - n_{par}. \quad (D.2)$$

El valor medio  $\bar{y}$  de  $y_i$  se define como:

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^N w_i \cdot y_i}{\sum_{i=1}^N w_i} = \frac{\sum_{i=1}^N w_i \cdot y_i}{W}. \quad (D.3)$$

Si todos los valores  $y_i$  tienen el mismo peso (los errores  $\sigma_i$  son iguales), esta expresión se reduce a la expresión estándar discutida en el Cap. 7. También definimos la *variancia total* como:

$$S_t^2 = \left( \frac{N}{N-1} \right) \frac{1}{W} \cdot \sum_{i=1}^N w_i \cdot (y_i - \bar{y})^2. \quad (D.4)$$

$S_t$  es una medida de la dispersión de los datos alrededor del valor medio de  $\bar{y}$ . Este valor no depende del modelo (función  $f(x)$ ), o sea que  $S_t$  ignora toda variación determinista de  $y$  con  $x$ .

También definimos la *varianza del ajuste*  $S_f^2$  como:

$$S_f^2 = \left( \frac{N}{N-n_{par}} \right) \cdot \frac{1}{W} \sum_{i=1}^N w_i \cdot (y_i - y(x_i))^2 = \left( \frac{N}{N-n_{par}} \right) \cdot \frac{1}{W} \chi^2. \quad (D.5)$$

La varianza del ajuste,  $S_f^2$ , similarmente a  $\chi^2$  o  $\chi_v^2$  (ver Apéndice C), mide la desviación del modelo respecto de los valores medidos. Cada término de la suma de la Ec. (D.5) es el valor de esta desviación, pesado por el factor  $w_i = 1/\sigma_i^2$ , o sea, indica cuán grande es esta desviación comparada con el error asociado a cada punto. Si cada término  $w_i(y_i - y(x_i))^2$  fuese del orden de la unidad, sería indicativo de un ajuste adecuado de los datos por parte del modelo propuesto. Así,  $S_f^2$  o  $\chi^2$ , resultan ser medidas adecuadas de la bondad del ajuste de  $y(x_i)$  a los valores medidos  $y_i$ . Si el modelo propuesto  $f(x)$  fuese adecuado, su valor estaría asociado a las fluctuaciones estadísticas de  $y_i$  respecto de su valor  $y(x_i)$ . Un valor de  $S_f^2$  del orden de la unidad o menor es indicativo de un modelo que puede ser adecuado para describir los datos.

A veces es útil definir el coeficiente de regresión, de modo similar a como lo hicimos en el Apéndice C (lo que también da una idea de la calidad del ajuste o bondad del modelo), como:

$$R^2 = \left( \frac{S_t^2 - S_f^2}{S_t^2} \right). \quad (D.6)$$

Si el modelo  $y(x_i)$  es una *buena* representación de los datos, es de esperar que  $S_f$  sea pequeño y que  $S_t \gg S_f$ , de donde se deduce que  $R^2 \approx 1$ . En caso contrario,  $S_t \approx S_f$ , por lo tanto,  $R^2 \approx 0$ .<sup>2</sup>

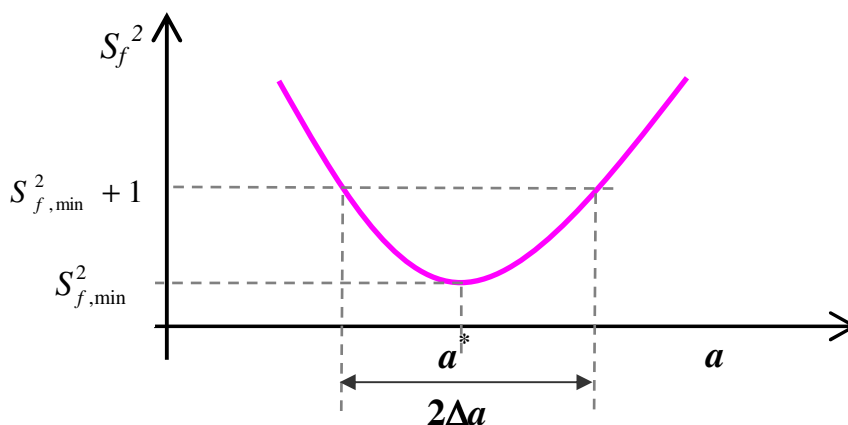
## D.2 Estimación de las incertidumbres de los parámetros del modelo

Al igual que en el caso del modelo lineal discutido en el Cap. 7 y en el Apéndice C, los mejores valores de los parámetros del modelo se obtienen de la minimización de la función  $S_f^2(a, b, c, \dots)$ , o sea, el mejor valor de del parámetro  $a$  del modelo,  $a^*$ , vendrá dado por:

$$a^* \Leftrightarrow \left. \frac{\partial S_f^2(a, b, c, \dots)}{\partial a} \right|_{a=a^*} = 0. \quad (D.7)$$

De modo que  $S_f^2 = S_f^2(a^*, b^*, \dots)$  es el mínimo de  $S_f^2$ .

La determinación de las incertidumbres en los parámetros  $(a^*, b^*, c^*, \dots)$  es un procedimiento sofisticado sobre el que existen diversas teorías y opiniones.<sup>1,2,3</sup> Un método aproximado y práctico para calcular estas incertidumbres en forma gráfica<sup>2</sup> se indica en la Figura D.2.



**Figura D.2** Esquema gráfico que ilustra un procedimiento aproximado para obtener las incertidumbres de los parámetros de un modelo no lineal.

Para el caso de una variable,  $a$ , la técnica consiste en graficar  $S_f^2$  en función de  $a$ .  $S_f^2$  pasará por un mínimo ( $a^*$ ) que determina el mejor valor del parámetro  $a$ . En este punto el valor de  $S_f^2$  será  $S_{f,\min}^2$ . Luego se determina el ancho del intervalo definido por las ordenadas que hacen  $S_f^2 = S_{f,\min}^2 + 1$ . Este intervalo de ordenadas determina<sup>2</sup> el intervalo de incerteza  $\Delta a$  del mejor valor  $a^*$ .

## D.3 Simulación de resultados experimentales – Método de Montecarlo

A menudo es útil simular las características de un experimento antes de llevarlo a cabo. Esto permite, por ejemplo, decidir el tamaño de los errores permitidos para observar un dado efecto. La técnica de **Montecarlo** es un formalismo probabilístico para generar

números con una distribución de probabilidad prefijada y que simulen los resultados de una variable física. Dado que una familia muy amplia de programas y hojas de cálculo comerciales ya posee generadores de números aleatorios con distribuciones de probabilidad preestablecida, la tarea de realizar simulaciones de Montecarlo se ha facilitado grandemente.

Para fijar ideas imaginemos que deseamos generar datos “sintéticos” o simulados de un experimento en el que cada medición dará como resultado la dupla  $(x_i, y_i)$ . Supongamos además que la relación esperada entre  $x$  e  $y$  es lineal, de la forma  $y = a \cdot x + b$ . Vamos a suponer que sólo los valores de  $y_i$  tienen una dispersión que viene descrita por una distribución normal, cuya desviación estándar está caracterizada por un parámetro de dispersión  $disp\%$  prefijado.

Para hacer más claro el ejemplo, vamos a suponer que trabajamos con una planilla de cálculo. En la primera columna de la planilla debemos definir el rango de valores de  $x$  en los que estamos interesados. En la segunda columna introducimos los valores de  $y$  obtenidos a través de la expresión analítica, con los valores de  $a$  y  $b$  que suponemos representativos del problema en cuestión. A estos valores de  $y$  los designamos como  $y_{teor}$  ( $=a \cdot x + b$ ). En la tercera columna calculamos los valores que van a caracterizar la dispersión de los datos ( $\Delta y_{teor}$ ) dados por:

$$\Delta y_{teor}(x_i) = y_{teor}(x_i) \cdot \frac{disp\%}{100}, \quad (D.8)$$

Seguidamente, procedemos a introducir el carácter aleatorio del experimento usando el método de Montecarlo. Para ello, en una nueva columna, usando la función de generación de números aleatorios de la planilla, introducimos los números al azar,  $rnd$ , elegidos de modo tal que se distribuyan normalmente con media 0 y desviación estándar 1, o sea,  $N(0,1)$ . Con estos valores podemos definir los valores simulados o datos sintéticos para la variable  $y_{sim}$  como:

$$y_{sim}(x_i) = y_{teor}(x_i) + \Delta y_{teor}(x_i) \cdot rnd \quad (D.9)$$

Los valores de  $y$  y  $\Delta y$  así obtenidos tienen las características de dispersión preestablecida (caracterizada por  $disp\%$ ). Esta técnica puede generalizarse para reproducir y simular situaciones reales en forma rápida y económica. En la página de Internet [www.fisicarecreativa.com](http://www.fisicarecreativa.com) (Recursos de Experimentos de Física) pueden encontrarse ejemplos de implementación de esta técnica a algunos ejemplos simples.

## Referencias

<sup>1</sup> P. Bevington y D.K. Robinson, *Data reduction and error analysis for the physical sciences*, 2ª ed. (McGraw-Hill, New York, 1993).

<sup>2</sup> Stuart L. Meyer, *Data analysis for scientists and engineers* (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1975).

<sup>3</sup> W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling y B.P. Flanner (eds.), *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3ª ed. (Cambridge University Press, 2007). <http://www.nr.com/>.