

# Tratamiento de Datos Experimentales

## Guía Complementaria FS - 2181

Hermann Albrecht<sup>1</sup>

Universidad Simón Bolívar, Departamento de Física

VERSIÓN: ABRIL, 2003

## Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Errores Experimentales</b>	<b>2</b>
2.1. Definiciones . . . . .	2
2.2. Precisión . . . . .	2
2.3. Exactitud . . . . .	3
2.4. Propagación de Errores . . . . .	3
2.5. Ejemplo . . . . .	4
<b>3. Estadística y Análisis de Datos Experimentales</b>	<b>5</b>
3.1. Límites de confianza . . . . .	5
3.2. Rechazo de Medidas . . . . .	6
<b>4. Presentación de Datos Experimentales</b>	<b>7</b>
4.1. Convenio de Cifras Significativas . . . . .	7
<b>5. Conclusiones</b>	<b>8</b>

## 1. Introducción

El presente trabajo es una recopilación y resumen de algunos textos de *Análisis Químico Cuantitativo* [7] y material relacionado con el manejo de datos experimentales y pretende ser un complemento a la *Guía de Laboratorio de Física* que normalmente se emplea en el curso FS-2181. Su principal enfoque es el tratamiento de datos obtenidos en un laboratorio para su correcta interpretación y discusión. El material que se presenta en esta guía complementaria puede ser usado en otros laboratorios y demás trabajos experimentales que el estudiante vaya a realizar a lo largo de su carrera y posterior ejercicio profesional.

El presente trabajo se ha organizado de la siguiente manera. La sección 2 se inicia con la debida definición de términos que serán ampliamente usados a lo largo de esta guía y se introducen las diferentes formas de expresar la precisión de nuestros datos experimentales (desviación estándar, varianza, etc.) completando con la propagación de errores.

En la tercera sección se discute brevemente algunos aspectos estadísticos relevantes para el análisis de resultados experimentales. Se define el Límite de Confianza de una serie

---

<sup>1</sup>Email: halbrech@fis.usb.ve

de medidas y se presentan algunos criterios para el rechazo de medidas dudosas.

Finalmente, para la última sección se ha dejado la discusión acerca de la forma adecuada de presentar los resultados de un experimento, haciendo especial hincapié en el concepto de cifras significativas.

## 2. Errores Experimentales

### 2.1. Definiciones

El **promedio**, denotado por  $\bar{x}$  ó  $\langle x \rangle$  y que también se denomina media aritmética o simplemente media, está definido como:

$$\bar{x} = \frac{X}{N} \quad X = \sum_{i=1}^N x_i \quad (1)$$

donde  $x_i$  representa los valores individuales.

La **mediana** de una serie de datos es aquel que queda en el centro cuando esta serie es ordenada por magnitud, de forma que haya igual número de datos mayores y menores a la mediana. Si hay un número impar de datos, la mediana se determina directamente, pero cuando este número es par, se promedia el valor de los dos datos centrales.

### 2.2. Precisión

La *precisión* nos da una medida de que tan cerca están uno de otro los datos que se han obtenido en una medida experimental. La forma de expresarlo reside en el cálculo de los errores, entre los cuales mencionaremos la *desviación estándar*, *varianza*, *desviación estándar relativa*, *coeficiente de variación*, entre otros.

La **desviación estándar** ( $\sigma$ ) se define como

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^2} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_i^2} = \sqrt{\langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle} \quad (2)$$

donde  $d_i = x_i - \langle x \rangle$  es la desviación respecto al promedio de la  $i$ -ésima medida.

La **varianza** ( $\sigma^2$ ) es simplemente es cuadrado de la desviación estándar:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \langle x \rangle)^2 = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle \quad (3)$$

Vale destacar que la desviación estándar tiene las mismas unidades de los datos, mientras que la varianza tiene unidades de los datos al cuadrado, por lo que es más común usar  $\sigma$  como medida de la precisión.

La **desviación estándar relativa (RSD)** se calcula dividiendo la  $\sigma$  de una serie de datos por la mediana de la misma y suele expresarse en partes por mil (ppm):

$$RSD = \frac{\sigma}{\langle x \rangle} \times 1000 \quad (4)$$

Cuando la RSD se expresa en porcentaje, se denomina **coeficiente de variación (CV)**

$$CV = \frac{\sigma}{\langle x \rangle} \times 100 \% \quad (5)$$

Igualmente puede definirse la **dispersión (W)**, o intervalo, de la serie de datos obtenida, que no es más que la diferencia entre el valor más alto y más bajo de dicha serie. Esta dispersión también puede expresarse porcentualmente y no es más dividir la expresión anterior entre el promedio y multiplicar por 100 %.

### 2.3. Exactitud

Mientras la precisión se refiere a la proximidad entre si de los datos experimentales obtenidos, la exactitud se refiere a la concordancia de nuestras medidas con los valores aceptados. Por ejemplo, si en un experimento estamos determinando una constante fundamental como la constante de Planck  $h$  o el cociente carga entre masa del electrón  $e/m_e$ , los errores absolutos se toman respecto a los valores establecidos para estas cantidades.

Así, en este orden de ideas, podemos definir el **error absoluto** respecto a una serie de datos como

$$\epsilon = |\langle x \rangle - x_v| \quad (6)$$

y el respectivo **error relativo porcentual** de la serie como

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{x_v} \times 100 \% \quad (7)$$

Hay que recordar que que los valores verdaderos que se están tomando son valores aceptados. Como se dijo al principio, éstos pueden ser constantes fundamentales, pero también puede tratarse cantidades patrón para calibrar un equipo. Como ejemplos de esto último podemos pensar en tener un patrón de peso para calibrar una balanza o un reactivo químico para estandarizar una solución, entre otros.

### 2.4. Propagación de Errores

Hasta ahora hemos establecido como asociar errores a una serie de datos tomados directamente de medidas experimentales. Sin embargo, lo más común es que los datos obtenidos en el laboratorio (distancias, tiempos, voltajes, corrientes, etc.) sean usados en una fórmula a través de la cual obtendremos el resultado deseado. Ejemplos de esto lo encontrarán durante éste y los próximos laboratorios de física básica, como también en los correspondientes a sus respectivas carreras académicas. Un recuento de importantes

experimentos relacionados con la determinación de constantes fundamentales de la física lo pueden encontrar en la referencia [4]

Para calcular el error ( $\Delta\phi$ ) asociado a una cantidad  $\phi$  que está dada por una ecuación cualquiera  $\phi = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , la forma en que podemos asociar los errores individuales ( $\Delta x_i$ ) de las cantidades medidas  $x_i$  con  $\Delta\phi$  es

$$\Delta\phi = \sum_{i=1}^n \left| \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \right| \Delta x_i \quad (8)$$

donde  $x_i$  los las  $n$  cantidades que tienen asociados un error experimental  $\Delta x_i$ .

Supongamos que en el laboratorio podemos medir dos cantidades  $A$  y  $B$  con sus respectivos errores  $\Delta A$  y  $\Delta B$ . Entonces, algunos ejemplos sencillos de propagación de errores son:

$$\begin{aligned} C = A \pm B &\Rightarrow \Delta C = \Delta A + \Delta B \\ C = AB &\Rightarrow \Delta C = B\Delta A + A\Delta B \\ C = \frac{A}{B} &\Rightarrow \Delta C = \frac{1}{B} \Delta A + \frac{A}{B^2} \Delta B \end{aligned} \quad (9)$$

donde se ha hecho uso de (8).

## 2.5. Ejemplo

Para ilustrar lo presentado anteriormente, supongamos que se tiene una serie de datos producto de la determinación del contenido de Hierro (Fe) en una muestra de un mineral. Los datos obtenidos se muestran en la siguiente tabla:

Medida	[Fe] (%)
1	2,03
2	1,94
3	1,98
4	2,01
5	1,95
6	1,96

Así, se tiene que

$\langle [Fe] \rangle$	1,98
$\sigma$	0,04
CV	2%
W	0,09
% W	5%

Con estos datos, se puede indicar que el porcentaje de Hierro en la muestra mineral es de  $1,98 \pm 0,04$  y que dado que el CV de la serie de datos es del 2 %, los datos presentados resultan aceptablemente precisos<sup>2</sup>.

### 3. Estadística y Análisis de Datos Experimentales

#### 3.1. Límites de confianza

Resulta evidente que si pudiéramos realizar un número infinito de mediciones, el valor medio obtenido de nuestra serie de datos correspondería al valor verdadero. Sin embargo, en general no es posible ni siquiera realizar un número grande de medidas. Usando herramientas estadísticas, podemos fijar límites alrededor de la media obtenida a partir de la probabilidad que el valor verdadero se encuentre en ese intervalo. Estos límites se denominan **Límites de Confianza**, mientras que el intervalo asociado se llama **Intervalo de Confianza**.

Si se ha logrado realizar un gran número de medidas, el tamaño del intervalo de confianza, que se deduce a partir de la desviación estándar, es mucho menor que si se han realizado sólo unas pocas medidas.

El Límite de Confianza del promedio de N medidas repetidas se deduce de

$$LC = \langle x \rangle \pm \frac{t\sigma}{\sqrt{N}} \quad (10)$$

donde  $t$  es la conocida *t de Student*. Los valores de este parámetro estadístico para varios niveles de probabilidad y de confianza se dan en la siguiente tabla<sup>3</sup>.

**Valores de t para distintos porcentajes de confianza**

N	80 %	90 %	95 %	99 %	99.9 %
1	3,08	6,31	12,7	63,7	637
2	1,89	2,92	4,30	9,92	31,6
3	1,64	2,35	3,18	5,84	12,9
4	1,53	2,13	2,78	4,60	8,60
5	1,48	2,02	2,57	4,03	6,86
6	1,44	1,94	2,45	3,71	5,96
7	1,42	1,90	2,36	3,50	5,40
8	1,40	1,86	2,31	3,36	5,04
9	1,38	1,83	2,26	3,25	4,78
10	1,37	1,81	2,23	3,17	4,59
$\infty$	1,29	1,64	1,96	2,58	3,29

<sup>2</sup>En general, valor de CV del orden de las unidades se consideran buenos. En el caso de Análisis Química Cuantitativo, que es lo que trata este ejemplo, el CV no debe pasar del 2 %.

<sup>3</sup>Los datos se han tomado de [7], en donde se encontrará una tabla más completa.

### 3.2. Rechazo de Medidas

Es posible que, luego de realizada una serie de mediciones, nos encontremos con que alguno de los datos obtenidos parezca no estar en concordancia con el resto. Hay un conjunto de reglas y pruebas estadísticas que nos permitan justificar dicho el rechazo de un dato que se presentarán a continuación

Una regla sencilla para descartar valores dudosos consiste en excluir de la serie de datos el valor que pudiera ser descartado. Con los datos restantes se calculan nuevamente el promedio y la desviación estándar. El rechazo puede considerarse justificado si la desviación del valor sospechoso ( $x_s$ ) con respecto a la media es, por lo menos, cuatro veces la desviación estándar de los valores:

$$|x_s - \langle x \rangle| \geq 4 \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i \neq s} (x_i - \langle x \rangle)^2} = 4\sigma' \quad (11)$$

Cuando se tienen muy pocas medidas (3 a 5) no es aconsejable rechazar datos sospechosos bajo este criterio, sino utilizar los test estadísticos, denominados **Test Q** y **Test T<sub>n</sub>**. En el **Test Q** se determina una  $Q_{exp}$  para el dato sospechoso que luego será comparado con los valores de  $Q$  dados en la próxima tabla. El  $Q_{exp}$  se define como

$$Q_{exp} = \frac{|x_s - x_n|}{W} \quad (12)$$

donde  $x_n$  es el valor más próximo a el valor sospechoso ( $x_s$ ) y  $W$  es la dispersión. Si  $Q_{exp}$  es mayor al  $Q$  dado en la siguiente tabla, el dato dudoso puede ser rechazado con el grado de confianza indicado. A continuación se presenta una tabla [7] para valores de  $Q$  a distintos porcentajes de confianza.

**Valores de Q para distintos porcentajes de confianza**

<b>N</b>	<b>90 %</b>	<b>95 %</b>	<b>99 %</b>
<b>3</b>	0,941	0,970	0,994
<b>4</b>	0,765	0,829	0,926
<b>5</b>	0,642	0,710	0,821
<b>6</b>	0,560	0,625	0,740
<b>7</b>	0,507	0,568	0,680
<b>8</b>	0,468	0,526	0,634
<b>9</b>	0,437	0,493	0,598
<b>10</b>	0,412	0,466	0,568

La *American Society for Testing Material* (ASTM) plantea el **Test T<sub>n</sub>**, donde se define una cantidad  $T_n$

$$T_n = \frac{|x_s - \langle x \rangle|}{\sigma} \quad (13)$$

como criterio de rechazo. En este caso, vale destacar que  $\langle x \rangle$  y  $\sigma$  son calculados incluyendo el valor dudoso. El rechazo está justificado si el valor calculado es mayor a los que se indican en la siguiente tabla.

**Valores de  $T_n$  para distintos porcentajes de confianza**

<b>N</b>	<b>90 %</b>	<b>95 %</b>	<b>99 %</b>
<b>3</b>	1,15	1,15	1,15
<b>4</b>	1,46	1,48	1,49
<b>5</b>	1,67	1,71	1,75
<b>6</b>	1,82	1,89	1,94
<b>7</b>	1,94	2,02	2,10
<b>8</b>	2,03	2,13	2,22
<b>9</b>	2,11	2,21	2,52
<b>10</b>	2,18	2,29	2,41

## 4. Presentación de Datos Experimentales

### 4.1. Convenio de Cifras Significativas

A la hora de presentar nuestros datos experimentales debemos prestar especial atención a la las cifras significativas (*cs*), que no son más que la cantidad de dígitos relevantes de un número. En el caso de un dato experimental directo, el número de *cs* estará limitado por la apreciación del instrumento usado. Por ejemplo, cuando medimos una distancia de  $\sim 20$  cm en una regla que está graduada en 0,1 cm, se podría decir, por ejemplo, que la longitud medida está entre 20,2 cm y 20,3 cm, pero no podemos asegurar si es 20,23 cm, 20,229 cm, etc., ya que el instrumento nos deja medir sólo hasta los milímetros. Así, el dato 20,2 cm tiene tres *cs*. Es importante que distingamos los conceptos de *cs* de los decimales. Nótese que nuestra medida de 20,2 cm tiene tres *cs*, pero sólo un decimal. Si expresáramos esta cantidad en notación científica,  $2,02 \times 10^1$  cm ó 2,02E01 cm, vemos que se mantienen las tres *cs*, pero ahora se cuenta con dos decimales.

En general, es preferible usar la notación científica para presentar un dato, ya que de esta manera se distingue la cantidad de *cs* de cantidades como 100. En principio, de esta cantidad no sabemos el número de *cs*, ya que puede ser una o tres. En cambio, si la escribimos como  $1,00 \times 10^2$  es claro que se tienen tres *cs*.

En el caso de que los datos experimentales obtenidos directamente son usados para calcular alguna cantidad relevante, hay que definir cómo se mantienen las *cs*. En el caso de sumas algebraicas, son los decimales de las cifras quienes determinan como expresar el resultado. Por ejemplo, si tenemos la suma

$$\begin{array}{r}
 3,41 \\
 + 0,020 \\
 + 5,7
 \end{array}$$

el resultado correcto se expresa como 8,7 y no 8,71. Es decir, los decimales a ser tomados en cuenta están determinados por el la cantidad que tenga el menor número de decimales.

Para el resto de las operaciones matemáticas, las *cs* del resultado está determinado las de aquel dato que tenga el mínimo. Por ejemplo, si queremos calcular el volumen de un cilindro y tenemos

$$\begin{aligned} V &= \pi r^2 \times h = \pi(5,3\text{cm})^2 \times 10,1\text{cm} \\ &= \pi \times 28\text{cm}^2 \times 10,1\text{cm} = 1,8 \times 10^3\text{cm}^3 \end{aligned}$$

Nótese que la cantidad  $(5,3)^2$  se ha tomado como 28 y no como 28,09. Si en lugar de volumen estuviésemos interesados en el área del cilindro, tendríamos que  $A = 2\pi rh$ . En este caso, el factor 2 se toma como 2,000..., es decir, con infinitas cifras significativas.

## 5. Conclusiones

Se ha presentado un resumen<sup>4</sup> con los aspectos relevantes del tratamiento de errores y la presentación de datos experimentales. Hay que destacar que se ha incluido el tratamiento estadístico de datos experimentales, introduciendo las nociones de Límites e Intervalos de Confianza y también presentando criterios para el rechazo consistente de datos dudosos.

Esta no pretende ser sino una guía complementaria, por lo que el estudiante está invitado a leer con mayor detenimiento otras fuentes bibliográficas. La mayoría de los libros de Química Analítica Cuantitativa tienen en los primeros capítulos discusiones sobre el tema. En este trabajo se han utilizado los textos [3] y [7], pero hay muchas referencias que se pueden consultar. Al final de esta guía se pueden encontrar otras referencias a textos especializados en montajes experimentales [1] como también en Física Experimental [2], [4] [6]. Igualmente puede consultarse la Web para encontrar otras presentaciones del manejo de errores experimentales, como es el caso de [5].

## Referencias

- [1] D. C. Baird, *Experimentation: an introduction to measurement theory and experiment design*, Prentice-Hall, 1995.
- [2] C. Cooke, *An introduction to experimental physics*, Taylor & Francis, 1996.
- [3] L. F. Hamilton, S. G. Simpson, D. W. Ellis, *Cálculos de Química Analítica*, 2da. edición en español, McGraw - Hill Interamericana de México, México 1988.

---

<sup>4</sup>Como se indicó al inicio de esta guía complementaria, se trata de un resumen de varias fuentes bibliográficas, especialmente [7].

- [4] National Institute of Standards and Technology (NIST), *The NIST Reference on Constants, Units, and Uncertainty: Fundamental Physical Constants - Index of Experiments*, <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/histindex.html>
- [5] I. Nieves Martínez, *Tratamiento Estadístico de los Datos Experimentales*, Universidad de Puerto Rico en Humacao, <http://cuhwww.upr.clu.edu/inieves/tratest.htm>
- [6] D. W. Preston, E. R. Dietz, *Art of experimental physics*, John Wiley & Sons, 1991.
- [7] D. A. Skoog, D. M. West, F. J. Holler, *Fundamentos de Química Analítica*, 4<sup>ta</sup>. Edición, Editorial Reverté, Barcelona 1997.