100cias@uned
Facultad de Ciencias
Enseñanza
Nº 1 (NUEVA ÉPOCA) | 2008

ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS

INFLUENCIA DE LA CORRELACIÓN ENTRE LOS PARÁMETROS DE AJUSTE EN LAS INCERTIDUMBRES DE LAS MAGNITUDES EXPERIMENTALES

INTRODUCCIÓN

El ajuste de los datos obtenidos mediante una medición a una función matemática es una práctica común en la Física Experimental, ya que ello permite comprobar y/o determinar las Leyes Físicas que rigen los experimentos en cuestión. Estas funciones ajustadas tienen la potencialidad de permitir encontrar valores que no han sido medidos.

Según las recomendaciones de la *Guía para la Medida de las Incertidumbres* (GUM) de la International Organization for Standardization [1], todo resultado debe ser reportado por el valor determinado para la magnitud bajo observación y su incertidumbre:

$$y \pm u_c(y) \tag{1}$$

La expresión recomendada por el GUM para calcular la incertidumbre que afecta al valor determinado es la expresión para el cálculo de la incertidumbre estándar combinada:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 u^2(x_i) + 2\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{k=i+1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)u_{(x_i,\,x_k)} \tag{2}$$

donde:

– La función: $y = f(X_1, X_2, ..., X_N)$ puede depender de N variables independientes $(X_1, X_2, ..., X_N)$,

– $\dfrac{\partial f}{\partial x_i} = \left.\dfrac{\partial f}{\partial X_i}\right|_{\overline{X_i}}$, y

– es $u\,(x_i,x_k)$ la covarianza estimada asociada a los valores x_i y x_k.

En el caso de los ajustes, las variables X_i corresponderán a los parámetros del ajuste.

En la práctica, los valores que alcanza la función ajustada no coinciden exactamente con los valores de los datos experimentales; esto se debe a que la función no tiene exactamente la representación matemática que hemos asumido o a que se han cometido errores en las mediciones (o a ambos). Estas desviaciones entre los datos experimentales y los valores que alcanza la función de ajuste se reflejan en la incertidumbre que presentan los parámetros de ajuste. Esta incertidumbre hay que tenerla presente cuando se reportan los valores extrapolados o interpolados utilizando la función de ajuste.

La comunidad científica presta gran atención a la forma en que se realizan los ajustes y se reportan las incertidumbres relacionadas con estos ajustes, como puede verse por ejemplo en las Referencias [2] y [3].

Describiremos aquí cómo se utiliza el método de los mínimos cuadrados para determinar los parámetros de la función construida como una combinación lineal de éstos en el caso del ajuste lineal. Se encontrarán las expresiones para el cálculo de la incertidumbre que afecta a estos parámetros y a los valores de la variable dependiente calculados a partir de la función de ajuste. Además, se generalizará el cálculo de la incertidumbre utilizando el tratamiento matricial, tanto en los parámetros como en los valores calculados, para el caso de ajustes lineales en los que se utilicen funciones polinómicas de grado superior a uno.

AJUSTE DE CURVAS EXPERIMENTALES POR EL MÉTODO DE LOS MÍNIMOS CUADRADOS

En el estudio de los fenómenos físicos es frecuentemente deseable conocer cuál es la dependencia funcional existente entre dos magnitudes medibles. Se considerará una de ellas como la variable independiente y la otra como la dependiente. Si se realiza una serie de mediciones de N puntos (x_i,y_i) correspondientes a diferentes valores de la variable independiente, consideraremos que las desviaciones de los valores sólo se producen en la variable dependiente.

Posiblemente el caso de mayor aplicación de ajuste lineal, es cuando la ecuación de ajuste corresponde a una línea recta, la cual puede escribirse como $y = A + B\,x$; los parámetros a determinar para la mejor recta serán A y B.

La esencia del método de los mínimos cuadrados es minimizar las diferencias cuadráticas entre las ordenadas de los puntos medidos y los correspondientes a la curva ajustada:

$$\sum_{i=1}^{N} d_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - A - B\ x_i \right)^2 \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial A} \sum_{i=1}^{N} d_i^2 = 0 \ ; \ \frac{\partial}{\partial B} \sum_{i=1}^{N} d_i^2 = 0 \tag{4}$$

De aquí se obtiene un sistema de dos ecuaciones con solución analítica. Con una pequeña manipulación algebraica obtenemos las siguientes expresiones para los parámetros:

$$A = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i \sum_{i=1}^{N} (x_i)^2 - \sum_{i=1}^{N} y_i x_i \sum_{i=1}^{N} x_i}{N \sum_{i=1}^{N} (x_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i \right)^2} \tag{5}$$

$$B = \frac{N \sum_{i=1}^{N} y_i x_i - \sum_{i=1}^{N} y_i \sum_{i=1}^{N} x_i}{N \sum_{i=1}^{N} (x_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i \right)^2} \tag{6}$$

La incertidumbre de los parámetros se determinará utilizando la ecuación (2), en un caso la función será la pendiente B y en otro, la ordenada en el origen A. Las variables independientes serán las y_i, por lo que la covarianza entre ellas es nula. De esta forma el segundo término de la derecha de la igualdad se anulará, puesto que los valores medidos fueron reportados como (x_i, y_i). Entonces la incertidumbre de los parámetros, en función de los valores medidos, se escribirá como:

$$u_A^2 = \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial A}{\partial y_i} \right)^2 = \frac{\sigma_{y_i}^2 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i^2}{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \overline{x})^2} \tag{7}$$

$$u_B^2 = \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial B}{\partial y_i} \right)^2 = \frac{\sigma_{y_i}^2}{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \overline{x})^2} \tag{8}$$

donde $\sigma_{y_i}^2$ es la varianza de las y_i, para la función ajustada con dos parámetros:

$$\sigma_{y_i}^2 = \frac{1}{N-2} \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - A - Bx_i \right)^2 \tag{9}$$

La incertidumbre de los valores calculados a partir de la función de ajuste se escribirá en función de la incertidumbre de los parámetros y de la covarianza que existe entre ellos:

$$u_c^2(y) = u_A^2 + 2\, u_{(A,B)} x + u_B^2\ x^2 \tag{10}$$

Como los dos parámetros no son independientes entre sí, habrá que calcular la covarianza que existe entre ellos. El valor de la covarianza fue calculado por Taylor [4] para el caso del ajuste a una recta:

$$u_{(A,B)}^2 = \sigma_{y_i}^2 \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial A}{\partial y_i} \frac{\partial B}{\partial y_i} = -\frac{\sigma_{y_i}^2 \overline{x}}{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \overline{x})^2} \tag{11}$$

El mismo Taylor encontró que la incertidumbre para el valor de la variable dependiente para un valor "x", interpolado o extrapolado, viene dado por:

$$u_c^2(y) = \frac{\sigma_{y_i}^2}{N} \frac{\sum_{i=1}^{N} (x_i - x)^2}{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \overline{x})^2} \tag{12}$$

Los programas de cálculo comerciales para ajustar curvas reportan de forma directa la incertidumbre en cada uno de los parámetros del ajuste pero no reportan la covarianza entre ellos. Si el cálculo de la incertidumbre de los valores obtenidos a partir de la expresión ajustada se realiza sin tener en cuenta la covarianza, entonces se está realizando una sobre-estimación de la incertidumbre asociada a la magnitud determinada. De esta forma podría resultar que $u_{y_i} > \sigma_{y_i}$. La expresión (12) es la fórmula correcta para calcular la incertidumbre del valor determinado y el resultado se expresará como $y \pm u_c(y)$.

USO DEL MÉTODO MATRICIAL PARA CALCULAR LAS COVARIANZAS

Cuando la función de ajuste viene representada por una función polinómica de grado dos o superior el cálculo de la incertidumbre resulta más laborioso, por ello se hace necesario encontrar un método que lo simplifique. Veamos como ejemplo una función lineal en los parámetros, que pudiera ser de tipo polinómica [5]:

$$y(x) = \sum_{k=1}^{p} a_k\ f_k(x) \tag{13}$$

donde las a_k son los parámetros del ajuste y las $f_k(x)$ las potencias $(k-1)$ de x.

Al aplicar el método de los mínimos cuadrados para el ajuste seguiremos los pasos vistos en (3) y (4) para obtener el sistema de ecuaciones que permite encontrar, de forma analítica, los parámetros del ajuste. De igual forma aquí se cuenta con N pares de valores (x_i, y_i) medidos.

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{N} y_i f_1(x_i) &= a_1 \sum_{i=1}^{N} f_1(x_i)\, f_1(x_i) + a_2 \sum_{i=1}^{N} f_1(x_i)\, f_2(x_i) + \\
&\quad + \ldots + a_p \sum_{i=1}^{N} f_1(x_i)\, f_p(x_i) \\
\sum_{i=1}^{N} y_i f_2(x_i) &= a_1 \sum_{i=1}^{N} f_2(x_i)\, f_1(x_i) + a_2 \sum_{i=1}^{N} f_2(x_i)\, f_2(x_i) + \\
&\quad + \ldots + a_p \sum_{i=1}^{N} f_2(x_i)\, f_p(x_i) \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \qquad (14)\\
\sum_{i=1}^{N} y_i f_p(x_i) &= a_1 \sum_{i=1}^{N} f_p(x_i)\, f_1(x_i) + a_2 \sum_{i=1}^{N} f_p(x_i)\, f_2(x_i) + \\
&\quad + \ldots + a_p \sum_{i=1}^{N} f_p(x_i)\, f_p(x_i)
\end{aligned}$$

El sistema de ecuaciones (14) se puede escribir en forma matricial, utilizando las matrices:

$$\beta = \{\beta_1,\ \beta_2,\ \ldots,\ \beta_p\}\ ;\ \mathrm{a} = \{\mathrm{a}_1, \mathrm{a}_2, \ldots, \mathrm{a}_p\}$$

$$\alpha = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & . & \alpha_{1p} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & . & \alpha_{2p} \\ . & . & . & . \\ \alpha_{p1} & \alpha_{p2} & . & \alpha_{pp} \end{vmatrix}$$

de la siguiente manera:

$$\beta = \mathrm{a} \cdot \alpha \qquad (15)$$

Los elementos de la matriz fila β tendrán la forma:

$$\beta_k = \sum_{i=1}^{N} y_i\, f_k(x_i) \qquad (16)$$

Los elementos de la matriz fila a son los parámetros de ajuste. Los elementos de la matriz simétrica α serán los elementos del determinante del sistema:

$$\alpha_{l,\,k} = \sum_{i=1}^{N} f_l(x_i)\, f_k(x_i) \qquad (17)$$

Para encontrar el valor de los parámetros bastará con multiplicar ambos lados de la ecuación (15) por la matriz inversa de alfa, α^{-1}, que simbolizaremos por ε.

$$\beta\,\varepsilon = \mathrm{a}\,\alpha\,\varepsilon = \mathrm{a}\,\alpha\,\alpha^{-1}$$

de donde se tiene la expresión para calcular los elementos de la matriz fila correspondientes con los parámetros del ajuste:

$$\mathrm{a} = \beta\,\varepsilon = \beta\,\alpha^{-1} \qquad (18)$$

De la ecuación (18) se tiene que una vez encontrada la matriz inversa los parámetros del ajuste se pueden calcular como:

$$\mathrm{a}_l = \sum_{k=1}^{p} (\beta_k \varepsilon_{kl}) = \sum_{k=1}^{p} \left\{ \varepsilon_{kl} \sum_{i=1}^{N} \left[y_i f_k(x_i) \right] \right\} \qquad (19)$$

Para estimar la incertidumbre asociada al ajuste recurriremos a las expresiones para calcular la incertidumbre de uno de los parámetros y la covarianza entre dos de ellos, respectivamente:

$$u^2(\mathrm{a}_j) = \sum_{i=1}^{N} \left[\sigma_{y_i}^2 \left(\frac{\partial \mathrm{a}_j}{\partial y_i} \right)^2 \right] \quad ; \quad u_{(\mathrm{a}_j,\,\mathrm{a}_l)} = \sum_{i=1}^{N} \left[\sigma_{y_i}^2 \frac{\partial \mathrm{a}_j}{\partial y_i} \frac{\partial \mathrm{a}_l}{\partial y_i} \right] \qquad (20)$$

donde hemos asumido que los valores y_i medidos son independientes entre sí y que la varianza de ellas se escribirá como:

$$\sigma_{y_i}^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{(N-p)} \left(y_i - \sum_{k=1}^{p} a_k f_k(x_i) \right)^2 \qquad (21)$$

Utilizando la ecuación (19) las derivadas se escribirán de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \mathrm{a}_l}{\partial y_i} = \sum_{k=1}^{p} \left[\varepsilon_{kl} f_k(x_i) \right] \qquad (22)$$

Al substituir (22) en (20) tendremos:

$$u_{(\mathrm{a}_j,\,\mathrm{a}_l)} = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \sigma_{y_i}^2 \sum_{k=1}^{p} \left[\varepsilon_{jk} f_k(x_i) \right] \sum_{m=1}^{p} \left[\varepsilon_{lm} f_m(x_i) \right] \right\} \qquad (23)$$

donde se ha utilizado la propiedad de la matriz simétrica α^{-1}, $\varepsilon_{jk} = \varepsilon_{kj}$. Además, el término de la suma que depende sólo de k podemos meterlo dentro del sumatorio con respecto a m y la suma total no se altera.

$$u_{(a_j,\,a_l)} = \sum_{i=1}^{N} \left\{ \sigma_{y_i}^2 \sum_{k=1}^{p} \varepsilon_{jk} \sum_{m=1}^{p} \left[\varepsilon_{lm}\ f_m(x_i)\, f_k(x_i) \right] \right\} \qquad (24)$$

Por último, podemos introducir la suma en i quedándonos la ecuación (24) como:

$$u_{(a_j,\, a_l)} = \sigma_{y_i}^2 \sum_{k=1}^{p} \left\{ \varepsilon_{jk} \sum_{m=1}^{p} \left[\varepsilon_{lm} \sum_{i=1}^{N} f_m(x_i) f_k(x_i) \right] \right\} =$$

$$= \sigma_{y_i}^2 \sum_{k=1}^{p} \left\{ \varepsilon_{jk} \sum_{m=1}^{p} [\varepsilon_{lm} \cdot \alpha_{mk}] \right\}$$

La suma :

$$\sum_{m=1}^{p} [\varepsilon_{lm} \cdot \alpha_{mk}] = I_{lk}$$

es el elemento que está en la columna k-ésima de la fila l-ésima de la matriz identidad. Entonces, nos quedará:

$$u_{(a_j,\, a_l)} = \sigma_{y_i}^2 \sum_{k=1}^{p} \left[\varepsilon_{jk} \cdot I_{lk} \right] = \sigma_{y_i}^2 \varepsilon_{jl} \qquad (25)$$

la expresión para calcular las varianzas y las covarianzas.

La matriz inversa α^{-1} es llamada la *matriz covarianza* debido a que a partir de sus elementos se obtienen las varianzas y covarianzas de los parámetros de ajuste. Es decir, a partir de los elementos de la diagonal principal se determinará la incertidumbre de los parámetros del ajuste y de los otros elementos se determinará la covarianza que existe entre dos de ellos.

EJEMPLO DE APLICACIÓN DEL AJUSTE LINEAL EN EL LABORATORIO DOCENTE USANDO EL MÉTODO MATRICIAL

En el laboratorio docente de Óptica de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana se utilizó un monocromador de prisma (tipo YLM de fabricación soviética) para determinar la anchura de banda de un filtro interferencial y uno óptico. Para ello se comparan las curvas de transmisión luminosa de ambos filtros a la mitad de la máxima intensidad transmitida. Se consideró un perfil gaussiano para ambas curvas de transmisión.

El monocromador se calibra utilizando las líneas espectrales de lámparas conocidas y un láser de He-Ne. La posición del prisma, respecto al haz incidente, es quien determina las longitudes de onda que emergen del monocromador.

En la Figura 1 se muestra cómo es la refracción de un haz de luz monocromático a través del prisma, el ángulo de desviación δ varía en función de la longitud de onda. Por ello es muy importante conocer la función que ajusta los valores de la longitud de onda emergente en dependencia de las posiciones relativas del prisma. En la Figura 2, se muestran los valores de las longitudes de onda (las líneas espectrales utilizadas) que emergen del monocromador en función de la posición relativa del prisma medida en una escala que trae el propio monocromador.

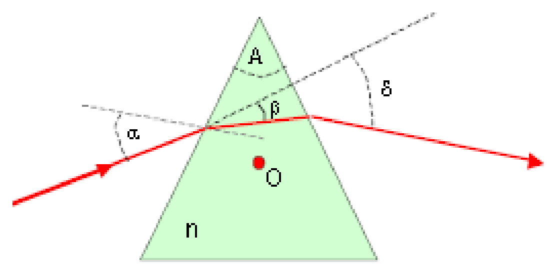

Figura 1. Trayectoria de un rayo monocromático a través del prisma.

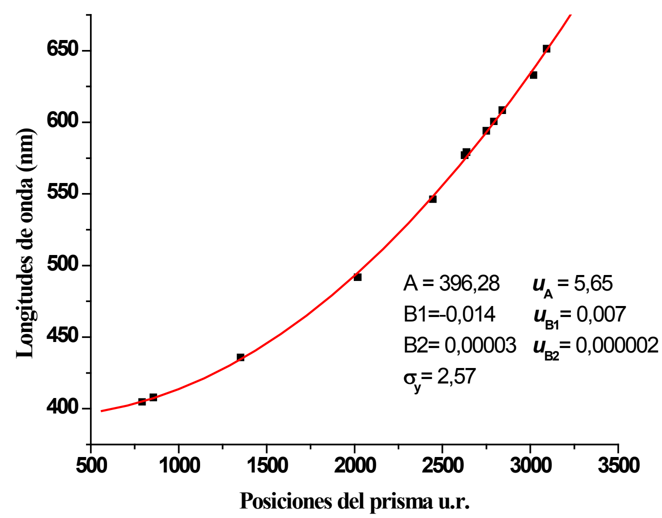

Figura 2. Curva para calibrar el prisma.

La función de ajuste propuesta es una parabólica, es decir, es una función polinómica de grado dos, con tres parámetros a determinar, cuya expresión será:

$$\lambda = A + B_1\, x + B_2\, x^2 \qquad (26)$$

El ajuste se realizó utilizando el programa Origin 7.0. En la Tabla 1 se dan los valores de los parámetros y sus incertidumbres reportados por el mismo programa.

Tabla 1
Valores de los parámetros del ajuste y sus incertidumbres

Parámetro	Incertidumbre
$A = 396{,}28$	$u_A = 5{,}65$
$B_1 = 0{,}014$	$u_{B_1} = 0{,}007$
$B_2 = 0{,}00003$	$u_{B_2} = 0{,}000002$

La función de ajuste para el prisma es:

$$\lambda = 396{,}28 + 0{,}014\,x + 0{,}00003\,x^2 \qquad (27)$$

donde la x representa el valor de la posición relativa del prisma.

Para determinar la anchura de banda de los filtros se utilizó en el monocromador una fuente de luz blanca y se midieron los valores de las intensidades para las longitudes de onda que deja pasar el filtro. En las Figuras 3a y 3b se muestran los valores de las intensidades para estas longitudes de onda. Se determinaron las posiciones del prisma para las cuales pasan las longitudes de onda que delimitan la anchura en longitudes de onda para la mitad de la intensidad máxima transmitida; en cada uno de los gráficos se han señalado estos valores. Sustituyendo estos valores de las posiciones relativas del prisma en la expresión (27) se obtendrán los valores de las longitudes de onda que delimitan la anchura que deja pasar el filtro.

En la Tabla 2, se muestran los valores de las anchuras de banda correspondientes a cada uno de los filtros.

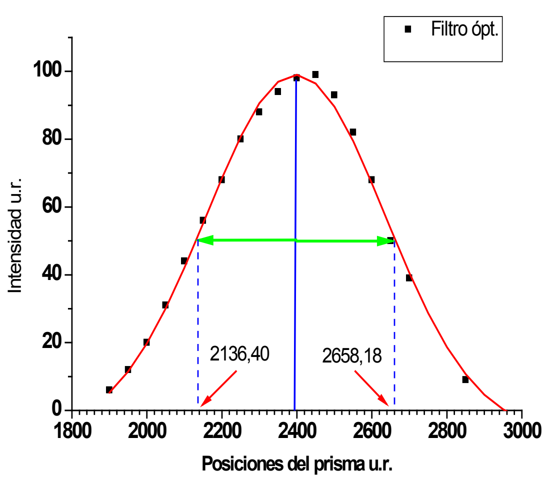

Figura 3a. Intensidades transmitidas por el filtro óptico.

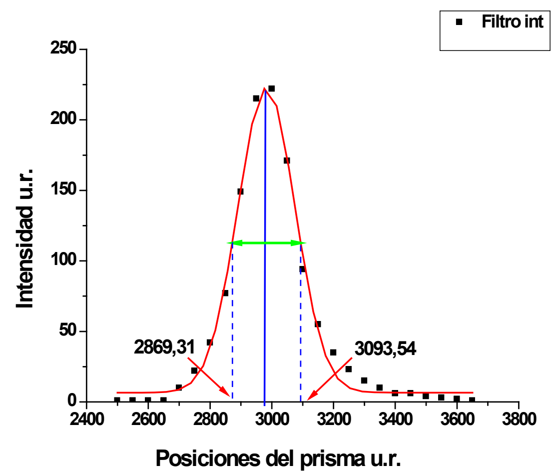

Figura 3b. Intensidades transmitidas por el filtro interferométrico.

La incertidumbre de los valores de las longitudes de onda encontradas a partir de la ecuación (27) la podremos determinar aplicando la ecuación (2) a la ecuación (26). De donde se obtiene:

$$u^2(\lambda) = u_A^2 + u_{B_1}^2 x^2 + u_{B_2}^2 x^4 + \\ +2\left(u^2_{(A,\,B_1)}\, x + u^2_{(A,\,B_2)}\, x^2 + u^2_{(B_1,\,B_2)}\, x^3\right) \qquad (28)$$

Una primera evaluación de la incertidumbre se realizó a partir de la ecuación (28) pero sólo teniendo en cuenta las incertidumbres de los parámetros reportados por el programa utilizado para el ajuste (el Origin no reporta los valores de las covarianzas entre los parámetros de ajuste); en el cálculo no se tuvo en cuenta los valores que están dentro del paréntesis en la ecuación (28). El valor encontrado para la incertidumbre se reporta en la penúltima columna de la Tabla 2. Como puede observarse, de los valores reportados en la Tabla 2 la incertidumbre encontrada, sin tener en cuenta la covarianza, es muy alta, está sobrevalorada.

Se escribió un programa en Excel 7.0 para realizar el ajuste a la función dada en (26), calcular los valores de las incertidumbres de los parámetros de ajuste y las covarianzas entre ellos. Los valores encontrados se sustituyeron en (28), obteniéndose una evaluación real de la incertidumbre para los valores de las longitudes de onda que definen la semianchura del filtro. Los valores determinados para la incertidumbre de la anchura de banda del filtro, teniendo en cuenta las covarianzas entre

Tabla 2
Valores para calcular la anchura de banda y su incertidumbre. En las dos últimas columnas se reportan los valores de la incertidumbre calculada sin considerar y considerando la covarianza entre los parámetros del ajuste

Tipo de Filtro	λ (nm) límite izquierdo	λ (nm) límite derecho	Anchura de banda (nm)	$u(\lambda)$ sin covarianza (nm)	$u(\lambda)$ con covarianza (nm)
Óptico	508,47	578,77	70,30	26,74	1,70
Interferométrico	615,30	650,32	35,02	26,74	1,87

los parámetros, se reportan en la última columna de la Tabla 2. Estos valores de la incertidumbre permiten confiar en los valores encontrados para las anchuras de banda de los filtros, a partir de una evaluación correcta de la misma.

CONCLUSIONES

Al utilizar una función para ajustar un conjunto de puntos experimentales hay que tener en consideración la covarianza entre los parámetros del ajuste al reportar la incertidumbre de un valor determinado utilizando la ecuación ajustada. Realizar la evaluación de la incertidumbre sin considerar la covarianza entre los parámetros de ajuste conduce a una sobrevaloración de la misma.

Los resultados que se han encontrado para determinar la dependencia del valor de la incertidumbre de la covarianza que existe entre los parámetros del ajuste pueden generalizarse a cualquier tipo de función que admita un ajuste lineal en sus parámetros, no hay que limitarse a una función polinómica como hemos supuesto en este trabajo.

BIBLIOGRAFÍA

1. BIPM, IEC, IFCC, USO, IUPAC, IUPAP & OIML 1995 Guide for the Expression of Uncertainty Measurement (Geneva: International Organization for Standardization).
2. Willink, R.: Estimation and uncertainty in fitting straight lines to data: different techniques. *Metrologia*, **45**, 290–298 (2008).
3. Sim, C.H. and Lim, M.H.: Evaluating expanded uncertainty in measurement with a fitted distribution. *Metrologia*, **45**, 178-184 (2008).
4. Taylor, J.R.: Simple examples of correlations in error propagation. *Am. J. Phys.*, **53**, 663-667 (1985).
5. Bevington, P.R. and Robinson, D.K.: Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences, 2nd ed. McGraw-Hill Companies, Inc., 115-140 (1992).

Octavio Calzadilla Amaya
Facultad de Física
Universidad de La Habana