



REGIONAL FUND QUALITY INFRASTRUCTURE FOR BIODIVERSITY & CLIMATE PROTECTION
IN LATIN AMERICA AND THE CARIBBEAN

Workshop on Statistic, data analysis and measurement uncertainty for Meteorology

Fundamentos estadísticos para la evaluación de la incertidumbre en las calibraciones

CENAM – Querétaro, México – 02 ~ 06.12.2019

Márcio A. A. Santana – INPE/BR
marcio.santana@inpe.br

Ricardo de A. Kalid – UFSB/BR
kalid@ufsb.edu.br





UFSB
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO SUL DA BAHIA



Fundamentos estadísticos de comparación y calibración de instrumentos meteorológicos

Fundamentos estadísticos de la calibración

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ es la FDP conjunta de las medidas experimentales, condicionada a \mathbf{z} y \mathbf{V}_z

\mathbf{z}_e : vector con las variables independiente (x_e) e dependiente (y_e) experimentales $\mathbf{z}_e = \begin{bmatrix} x_e \\ y_e \end{bmatrix}$

\mathbf{z} : vector con los datos reales (desconocidos) $\mathbf{z} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$

\mathbf{V}_z : matriz de varianza-covarianza de los erros experimentales

\mathbf{V}_z : matriz de varianza-covarianza de los erros experimentales

$\boldsymbol{\varepsilon}_z$: vector de los erros experimentales (desconocidos)

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los erros experimentales es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

$$N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \det(\mathbf{V}_z)}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z})^T \cdot \mathbf{V}_z^{-1} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z}) \right]$$

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los erros experimentales es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \det(\mathbf{V}_z)}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z})^T \cdot \mathbf{V}_z^{-1} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z}) \right]$$

Hipótesis 2: Las medidas no se influyen mutuamente

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim \prod_{i=1}^n \mathbb{P}_i(\mathbf{z}_{e_i} | \mathbf{z}_i, \mathbf{V}_{z_i})$$

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 :

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_{e_i} | \mathbf{z}_i, \mathbf{V}_{z_i}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \det(\mathbf{V}_{z_i})}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z}_i)^T \cdot \mathbf{V}_{z_i}^{-1} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z}_i) \right]$$

Método de máxima verosimilitud

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los erros experimentales es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 :

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}_i, \mathbf{V}_{z_i}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \det(\mathbf{V}_{z_i})}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z}_i)^T \cdot \mathbf{V}_{z_i}^{-1} \cdot (\mathbf{z}_e - \mathbf{z}_i) \right]$$

Hipótesis 3: Las medidas de las variables independientes e dependientes no se influyan mutuamente

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim \prod_{i=1}^n [\mathbb{P}_{x_i}(\mathbf{x}_{e_i} | \mathbf{x}_i, \mathbf{V}_{x_i}) \cdot \mathbb{P}_{y_i}(\mathbf{y}_{e_i} | \mathbf{y}_i, \mathbf{V}_{y_i})]$$

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 + Hipótesis 3 :

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) = \prod_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \det(\mathbf{V}_{x_i})}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_i)^T \cdot \mathbf{V}_{x_i}^{-1} \cdot (\mathbf{x}_e - \mathbf{x}_i) \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \det(\mathbf{V}_{y_i})}} \cdot \exp \left[-\frac{1}{2} \cdot (\mathbf{x}_e - \mathbf{y}_i)^T \cdot \mathbf{V}_{y_i}^{-1} \cdot (\mathbf{y}_e - \mathbf{y}_i) \right] \right\}$$

Método de máxima verosimilitud

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los erros experimentales es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2 Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3: Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas

Hipótesis 2 + Hipótesis 3: \mathbf{V}_x y \mathbf{V}_y son matrices diagonales

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim \prod_{i=1}^n \left\{ \left[\prod_{j=1}^{n_x} \mathbb{P}_{x_{ij}}(x_{e_{ij}} | x_{ij}, \sigma_{x_{ij}}^2) \right] \cdot \left[\prod_{k=1}^{n_y} [\mathbb{P}_{y_{ik}}(y_{e_{ik}} | y_{ik}, \sigma_{y_{ik}}^2)] \right] \right\}$$

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 + Hipótesis 3 :

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) == \prod_{i=1}^n \left\{ \left[\prod_{j=1}^{n_x} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_{x_{ij}}^2}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{e_{ij}} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right) \right] \cdot \left[\prod_{k=1}^{n_y} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_{y_{ik}}^2}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{e_{ik}} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ik}}^2} \right) \right] \right\}$$

Maximizar $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 + Hipótesis 3 :

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) == \prod_{i=1}^n \left\{ \left[\prod_{j=1}^{n_x} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_{x_{ij}}^2}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{e_{ij}} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right) \right] \cdot \left[\prod_{k=1}^{n_y} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_{y_{ik}}^2}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{e_{ik}} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ik}}^2} \right) \right] \right\}$$



Método de máxima verosimilitud



Maximizar $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

$$\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \prod_{i=1}^n \left\{ \left[\prod_{j=1}^{n_x} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_{x_{ij}}^2}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right) \right] \cdot \left[\prod_{k=1}^{n_y} \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_{y_{ik}}^2}} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ik}}^2} \right) \right] \right\}$$

Pero $\sigma_{x_{ij}}^2$ y $\sigma_{y_{ik}}^2$ son fijos (constantes), entonces

$$\max \mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \Leftrightarrow \max Q(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$$

$$Q(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \prod_{i=1}^n \left\{ \left[\prod_{j=1}^{n_x} \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right) \right] \cdot \left[\prod_{k=1}^{n_y} \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ik}}^2} \right) \right] \right\}$$

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 + Hipótesis 3



Método de máxima verosimilitud



Maximizar $Q(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

$$Q(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \prod_{i=1}^n \left\{ \left[\prod_{j=1}^{n_x} \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right) \right] \cdot \left[\prod_{k=1}^{n_y} \exp \left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ij}}^2} \right) \right] \right\}$$

Pero aplicando \ln , que es una función monotónicamente creciente:

$$\max \mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \Leftrightarrow \max Q(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \Leftrightarrow \max S(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$$

$$S(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^{n_x} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right] + \sum_{k=1}^{n_y} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ij}}^2} \right] \right\}$$

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Hipótesis 1 + Hipótesis 2 + Hipótesis 3

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los erros experimentales es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las mgnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3: Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas

$$\mathcal{L}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) = \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^{n_x} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{ij})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right] + \sum_{k=1}^{n_y} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{ik})^2}{\sigma_{y_{ij}}^2} \right] \right\}$$

Pero x_{ij} y y_{ik} son los **valores reales**, que son **desconocidos**, entonces los errores $\varepsilon_{x_{ij}} = (x_{eij} - x_{ij})$ y $\varepsilon_y = (y_{eij} - y_{ij})$ también son **desconocidos**! O que hacer?

Pregunta: Pero x_{ij} y y_{ik} son los **valores reales**, que son **desconocidos**, entonces los errores $\varepsilon_{x_{ij}} = (x_{e_{ij}} - x_{ij})$ y $\varepsilon_y = (y_{e_{ij}} - y_{ij})$ también son **desconocidos**! O que hacer?

Respuesta:

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

$$g(y_m | x_m, p) = 0 \Rightarrow y_m = f(x_m, p)$$

f : vector con ecuaciones del modelo explícito o función de medición

x_m : vector de magnitudes independientes

y_m : vector de magnitudes dependientes

p : vector de parámetros

r_x : vector de residuos independientes

r_y : vector de residuos dependientes

$$x_{ij} \rightarrow x_{m_{ij}} \Rightarrow \varepsilon_{x_{ij}} \rightarrow r_{x_{ij}} = (x_{e_{ij}} - x_{m_{ij}})$$

$$y_{ij} \rightarrow y_{m_{ij}} \Rightarrow \varepsilon_{y_{ij}} \rightarrow r_{y_{ij}} = (y_{e_{ij}} - y_{m_{ij}})$$



UFSC
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO SUL DA BAHIA

Método de máxima verosimilitud



Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto $y_{m_{ik}} = f(x_e, y_e, p)$, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los residuos ($\mathbf{r} = \mathbf{z}_e - \mathbf{z}_m$) es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3: Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas (coeficientes de auto correlaciones $\cong 0$)

$$L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) = \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^{n_x} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{m_{ij}})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right] + \sum_{k=1}^{n_y} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{m_{ik}})^2}{\sigma_{y_{ij}}^2} \right] \right\}$$

$L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y)$ es la función verosimilitud (*Likelihood function*)

Método de máxima verosimilitud

$$\max \mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \Leftrightarrow \max L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y)$$

$$L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) = \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^{n_x} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(x_{eij} - x_{mij})^2}{\sigma_{xij}^2} \right] + \sum_{k=1}^{n_y} \left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{(y_{eik} - y_{mij})^2}{\sigma_{yij}^2} \right] \right\}$$

$L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y)$ es la función verosimilitud (*Likelihood function*)

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto $y_{m_{ik}} = f(x_e, y_e, p)$, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los residuos ($\mathbf{r} = \mathbf{z}_e - \mathbf{z}_m$) es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim \mathcal{N}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3 : Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas (coeficientes de auto correlaciones $\cong 0$)

Método de máxima verosimilitud

Pero $\max f \Leftrightarrow \min -f$ entonces

$$\max \mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \Leftrightarrow \max L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) \Leftrightarrow \min -L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y)$$

$$\min \left\{ -L(\mathbf{x}_e, \mathbf{y}_e | \mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y) = \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^{n_x} \left[\frac{(x_{eij} - x_{mij})^2}{\sigma_{xij}^2} \right] + \sum_{k=1}^{n_y} \left[\frac{(y_{eik} - y_{mij})^2}{\sigma_{yij}^2} \right] \right\} \right\}$$

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto $y_{m_{ik}} = f(x_e, y_e, p)$, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los residuos ($\mathbf{r} = \mathbf{z}_e - \mathbf{z}_m$) es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3 : Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas (coeficientes de auto correlaciones $\cong 0$)

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto $y_{m_{ik}} = f(x_e, y_e, p)$, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los residuos ($\mathbf{r} = \mathbf{z}_e - \mathbf{z}_m$) es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3 : Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas (coeficientes de auto correlaciones $\cong 0$)

$$\min_{\mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{p}} \left\{ \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{j=1}^{n_x} \left[\frac{(x_{e_{ij}} - x_{m_{ij}})^2}{\sigma_{x_{ij}}^2} \right] + \sum_{k=1}^{n_y} \left[\frac{(y_{e_{ik}} - y_{m_{ij}})^2}{\sigma_{y_{ij}}^2} \right] \right\} \right\}$$

Método dos Mínimos Cuadrados Ortogonias

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los residuos ($\mathbf{r} = \mathbf{z}_e - \mathbf{z}_m$) es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim N(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3 : Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas (coeficientes de auto correlaciones $\cong 0$)

Hipótesis 4 : Las incertidumbre de las magnitudes independientes son mucho mejores que las incertidumbre de las magnitudes dependientes

Método dos Mínimos Cuadrados Ponderados

$$\min_{\mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{p}} \left\{ \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{k=1}^{n_y} \left[\frac{(y_{e_{ik}} - y_{m_{ij}})^2}{\sigma_{y_{ij}}^2} \right] \right\} \right\}$$

Regresión ponderada

Regresión lineal ponderada,

si $y_{m_{ij}}$ es lineal en los parámetros

WLS (Weighted Least Square)

Presupuesto 1: Se conocen la PDF conjunta $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$ de los erros experimentales

Presupuesto 2: Se conocen un modelo perfecto, por lo que los valores reales pueden ser reemplazados por la respuesta del modelo

Hipótesis 1: La PDF conjunta de los residuos ($\mathbf{r} = \mathbf{z}_e - \mathbf{z}_m$) es normal (o gaussiana) $\mathbb{P}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z) \sim \mathcal{N}(\mathbf{z}_e | \mathbf{z}, \mathbf{V}_z)$

Hipótesis 2: Las medidas de las magnitudes no se influyan mutuamente

Hipótesis 3 : Las medidas de las magnitudes independientes e dependientes no son auto correlacionadas (coeficientes de auto correlaciones $\cong 0$)

Hipótesis 4 : Las incertidumbre de las magnitudes independientes son mucho mejores que las incertidumbre de las magnitudes dependientes

Hipótesis 5 : Las incertidumbre de las magnitudes dependientes son iguales

Método dos Mínimos Cuadrados Ordinarios

$$\min_{\mathbf{x}_m, \mathbf{y}_m, \mathbf{p}} \left\{ \sum_{i=1}^n \left\{ \sum_{k=1}^{n_y} \left[(y_{eik} - y_{mij})^2 \right] \right\} \right\}$$

Regresión

Regresión lineal,

si y_{mij} es lineal en los parámetros

OLS (Ordinary Least Square)



UFSB
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO SUL DA BAHIA



Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES

Regresión Ordinaria

o Regresión o

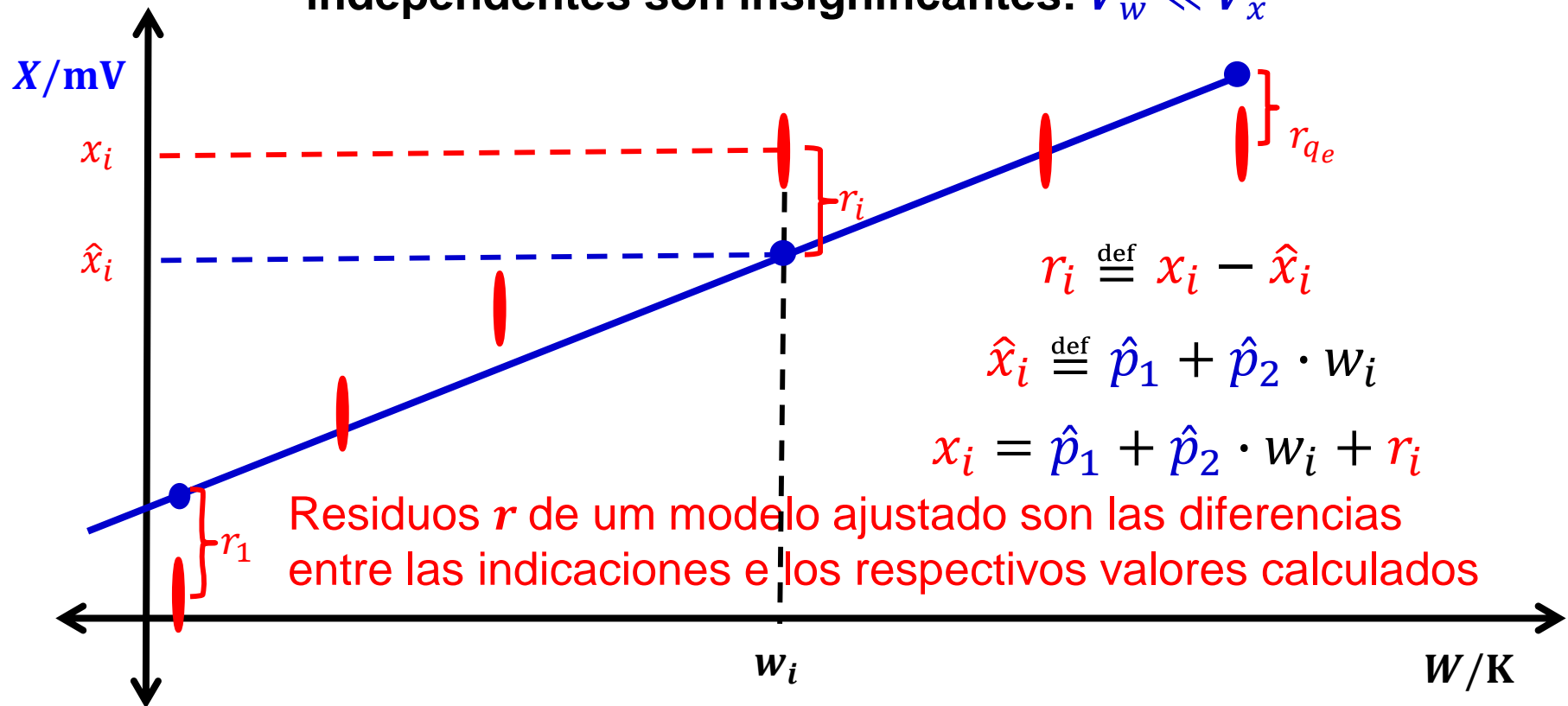
Mínimos Cuadrados Ordinarios

OLS – Ordinary Least Square

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES

Supuesto 1: un modelo lineal en los parámetros representa correctamente los datos experimentales: $X = p_1 + p_2 \cdot W$

Supuesto 2: las incertidumbres de las variables independientes son insignificantes: $V_w \ll V_x$



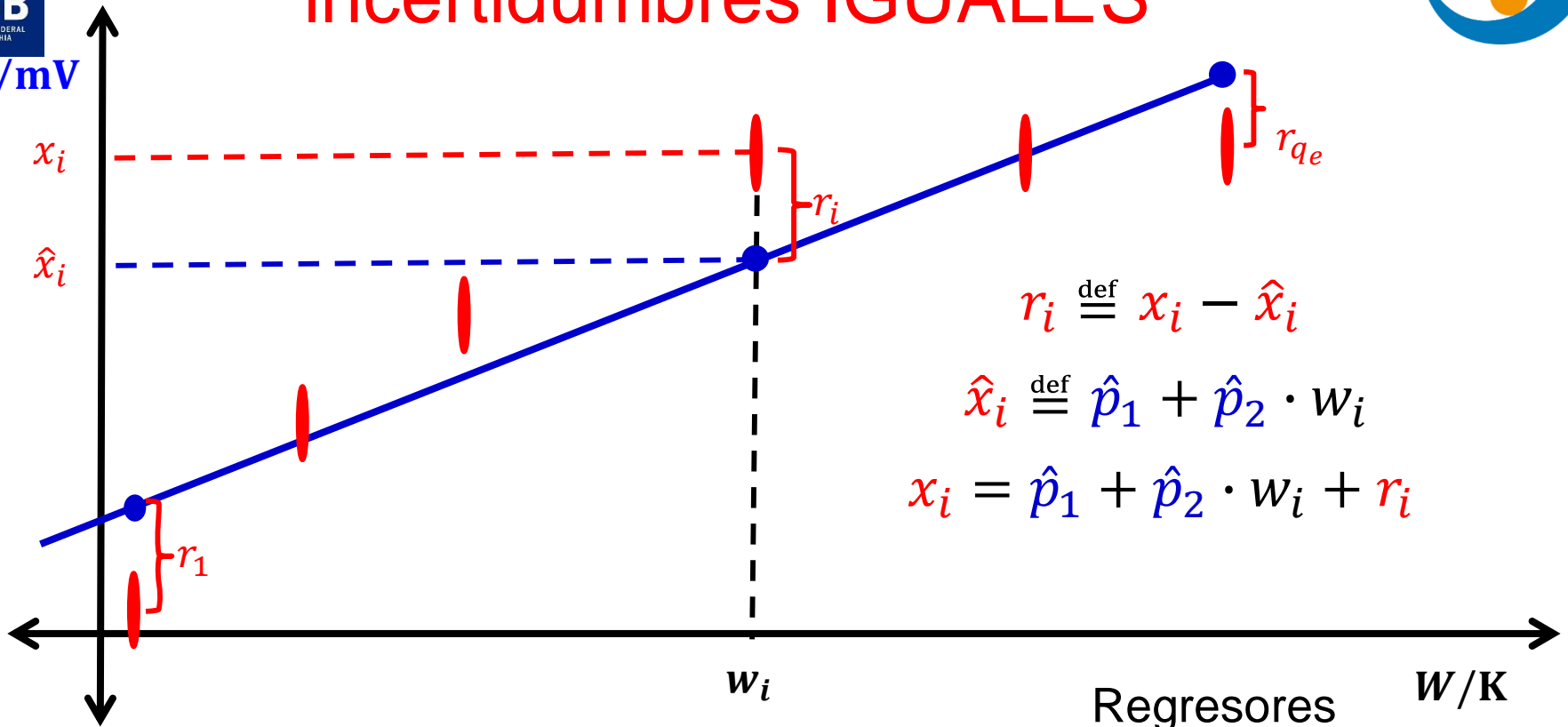
$p = [p_1 \ p_2]^T$: vector real de parámetros reales, desconocido

$\hat{p} = [\hat{p}_1 \ \hat{p}_2]^T$: vector de parámetros estimado a determinar

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES



X/mV



$$r_i \stackrel{\text{def}}{=} x_i - \hat{x}_i$$

$$\hat{x}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i$$

$$x_i = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i + r_i$$

Hay q_e realizaciones experimentales:

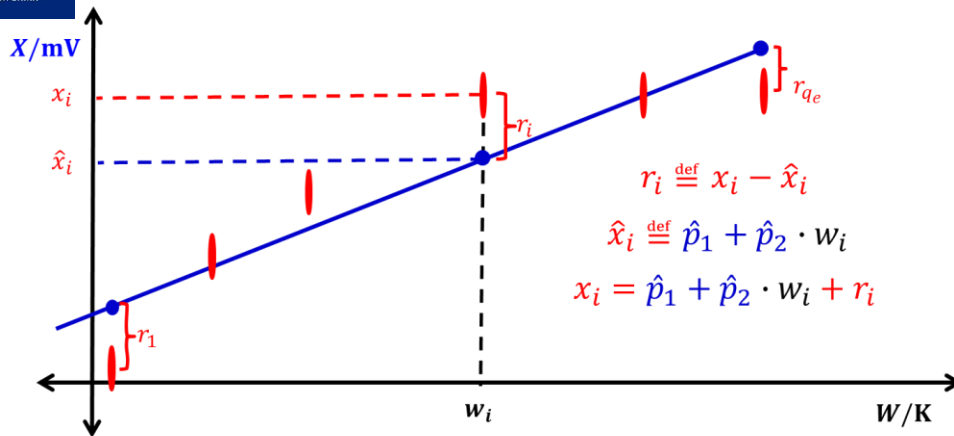
$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_1 + r_1 \\ x_2 = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_2 + r_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_{q_e} + r_{q_e} \end{array} \right\}$$

Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES



Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

Supuesto 1: $\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$

- Idealmente, todos los residuos de r_i deben ser cero, pero debido a las incertidumbres experimentales, esto nunca ocurre
- Por lo tanto, el objetivo puede ser minimizar la suma de los módulos de residuos, pero la función del módulo no es diferenciable
- Pero, la suma de los cuadrados de los residuos es diferenciable y tiene muy buenas propiedades estadísticas

Supuesto 2: las incertidumbres de las variables independientes son insignificantes: $V_w \ll V_x$

Función objetivo: minimizar la suma de los cuadrados de los residuos

$$\min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} (r_i)^2 \right\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} (x_i - (\hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i))^2 \right\}$$

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES



$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix}$$

Regresores

Función objetivo: minimizar la suma de los cuadrados de los residuos

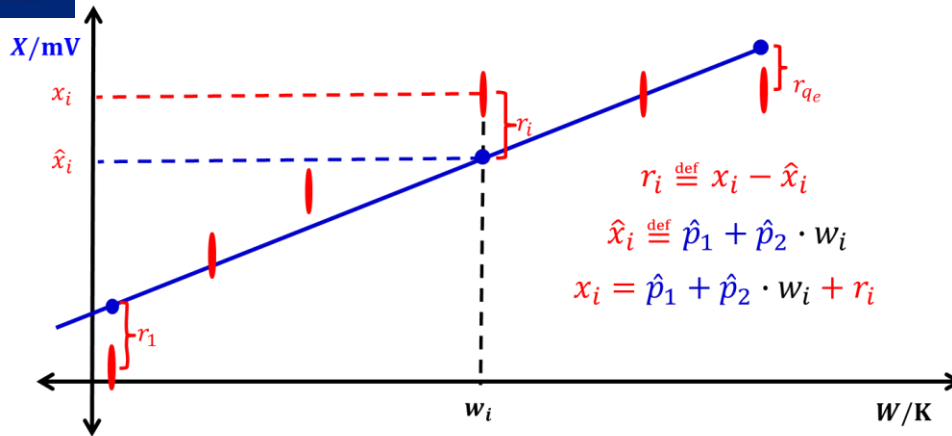
$$\min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} (r_i)^2 \right\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} \left(\begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} - x_i \right)^2 \right\} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

Podemos reescribir con álgebra matricial la función:

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = \sum_{i=1}^{q_e} (r_i)^2 = \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r} = (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})$$

$$\text{Función objetivo: } \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$$

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES



Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

Función objetivo: $\min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$

Sin restricciones \rightarrow solución: primera derivada igual a cero

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{0} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{p}_1} = 0 \\ \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{p}_2} = 0 \end{array} \right\}$$

Gradiente de $F(\mathbf{p}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = 0$

$$\nabla_{\mathbf{p}} F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = \mathbf{0}$$

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES

Función objetivo: $\min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})$$

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = (\mathbf{x}^T - \hat{\mathbf{p}}^T \cdot \mathbf{R}^T) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})$$

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}^T \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} + \hat{\mathbf{p}}^T \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}$$

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{0} - \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} - \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} + 2\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = -2\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} + 2\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x}$$

$$\frac{\partial^2 F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}^2} = 2\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} > \mathbf{0} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} \text{ es mínimo}$$

Supuesto 1: un modelo lineal en los parámetros representa correctamente los datos experimentales, $\hat{x}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i$

Supuesto 2: las incertidumbres de las variables independientes son insignificantes, $V_w \ll V_x$

Supuesto 3: $\exists (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1}$

Álgebra matricial

$$a) \quad \frac{\partial b^T \cdot x}{\partial x} = b$$

$$b) \quad \frac{\partial x^T \cdot b}{\partial x} = b$$

$$c) \quad \frac{\partial (x^T \cdot A \cdot z)}{\partial x} = A \cdot z$$

$$d) \quad \frac{\partial (x^T \cdot A \cdot x)}{\partial x} = A \cdot x + A^T \cdot x$$

$$e) \quad \frac{\partial^2 (x^T \cdot A \cdot x)}{\partial x^2} = (A + A^T)$$

Si la matriz A es simétrica:

$$f) \quad \frac{\partial (x^T A \cdot x)}{\partial x} = 2 A \cdot x$$

$$g) \quad \frac{\partial^2 (x^T A \cdot x)}{\partial x^2} = 2 A$$

$$h) \quad \text{Si } \exists A^{-1}$$

$$\rightarrow (A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$$



Incertidumbre de los parámetros estimados



$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \Rightarrow E\{\hat{\mathbf{p}}\} = E\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\hat{\mathbf{p}} - E\{\hat{\mathbf{p}}\}) \cdot (\hat{\mathbf{p}} - E\{\hat{\mathbf{p}}\})^T\} = E\{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - E\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - E\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\})^T\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = E\{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{A} \cdot E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A}^T - E\{\mathbf{x}\}^T \cdot \mathbf{A}^T)\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = E\{\mathbf{A} \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x}^T - E\{\mathbf{x}\}^T) \cdot \mathbf{A}^T\} = E\{\mathbf{A} \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^T \cdot \mathbf{A}^T\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{A} \cdot E\{(\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^T\} \cdot \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}^T$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}^T$$

$$\mathbf{A} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T$$

La varianza (incertidumbre) de los parámetros estimados depende de la varianza experimental (incertidumbre) de las variables dependientes.

Incertidumbre de los parámetros estimados

$$V_{\hat{p}} = V\{\hat{p}\} = V\{A \cdot \mathbf{x}\} = A \cdot V_{\mathbf{x}} \cdot A^T$$

Supuesto 4: \mathbf{x} es homoscedastic, tiene varianza constante $\Rightarrow V_{\mathbf{x}} = \sigma_{\mathbf{x}}^2 \cdot I$

$$V_{\hat{p}} = A \cdot \sigma_{\mathbf{x}}^2 \cdot I \cdot A^T = \sigma_{\mathbf{x}}^2 \cdot A \cdot A^T$$

$$V_{\hat{p}} = A \cdot \sigma_{\mathbf{x}}^2 \cdot I \cdot A^T = \sigma_{\mathbf{x}}^2 \cdot (R^T \cdot R)^{-1} \cdot (R^T \cdot R) \cdot (R^T \cdot R)^{-1}$$

$$V_{\hat{p}} = \sigma_{\mathbf{x}}^2 \cdot (R^T \cdot R)^{-1}$$

La varianza (incertidumbre) de los parámetros estimados depende de la varianza experimental (incertidumbre) de las variables dependientes.

Incertidumbre de los parámetros estimados

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = E\{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{p}) \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{p})^T\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}) \cdot (\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})^T\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{A} \cdot E\{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}^T\} \cdot \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \cdot E\{\mathbf{V}_{\mathbf{r}}\} \cdot \mathbf{A}^T$$

Supuesto 6: \mathbf{r} es homoscedastic, tiene varianza constante $\Rightarrow \mathbf{V}_{\mathbf{r}} = \sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot \mathbf{I}$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{A} \cdot E\{\sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot \mathbf{I}\} \cdot \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \cdot \sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot \mathbf{I} \cdot \mathbf{A}^T = \sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^T$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \left((\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \right)^T$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R}) \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} = \sigma_{\mathbf{r}}^2 \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1}$$

$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}}$: matriz de varianza-covarianza de los parámetros

$\sigma_{\mathbf{r}}$: incertidumbre de residuos

σ_r : incertidumbre de residuos

$$\mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}$$

$$E\{\mathbf{r}\} = E\{\mathbf{x}\} - E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\} = E\{\mathbf{x}\} - \mathbf{R} \cdot E\{\hat{\mathbf{p}}\} = E\{\mathbf{x}\} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p}$$

$$V\{\mathbf{r}\} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\mathbf{r} - E\{\mathbf{r}\})^2\}$$

$$\text{Mas } E\{\mathbf{r}\} = \mathbf{0} \Rightarrow V\{\mathbf{r}\} = E\{\mathbf{r}^2\}$$

$$V\{\mathbf{x}\} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^2\} = E\{(\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^2\} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p})^2\}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r} \Rightarrow E\{\mathbf{x}\} = E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}\} = E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\} + E\{\mathbf{r}\} = E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\} = \mathbf{R} \cdot E\{\hat{\mathbf{p}}\} =$$

$$\text{Se } \hat{\mathbf{p}} \cong \mathbf{p} \Rightarrow (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \cong (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{r}$$

$$V\{\mathbf{x}\} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p})^2\} \cong E\{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2\} = E\{\mathbf{r}^2\} = V\{\mathbf{r}\}$$

$V\{\mathbf{x}\} \cong V\{\mathbf{r}\} \Rightarrow$ La varianza (incertidumbre) de los residuos puede ser aproximada por la varianza (incertidumbre) de las variables dependientes

Calibración unidireccional con incertidumbres IGUALES

Supuesto 1: un modelo lineal en los parámetros representa correctamente los datos experimentales

Supuesto 2: las incertidumbres de las magnitudes independientes son insignificantes

Supuesto 3: $\exists (R^T \cdot R)^{-1}$

$$\hat{p} = (R^T \cdot R)^{-1} \cdot R^T \cdot x = A \cdot x$$

Supuesto 4: A e r são independentes $\Leftrightarrow E\{A \cdot r\} = E\{A\} \cdot E\{r\}$

Supuesto 5: $E\{r\} = 0 \Rightarrow A$ e r são ortogonais $\Leftrightarrow E\{A \cdot r\} = E\{A\} \cdot E\{r\} = 0$

$$V_p = E\{(A \cdot x - p) \cdot (A \cdot x - p)^T\} = E\{A \cdot r \cdot r^T \cdot A^T\}$$

Supuesto 6: r es ruido blanco (homodasticidad) $\Rightarrow V_r = I \cdot \sigma_r^2 \cong I \cdot \sigma_x^2$

$$V_p = A \cdot E\{r \cdot r^T\} \cdot A^T = A \cdot E\{V_r\} \cdot A^T = \sigma_r^2 \cdot A \cdot A^T = \sigma_r^2 \cdot (R^T \cdot R)^{-1}$$

Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} 1 & w_{11} & \cdots & w_{1q_p} \\ 1 & w_{21} & \cdots & w_{2q_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & w_{q_e1} & \cdots & w_{q_eq_p} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \\ \vdots \\ \hat{p}_{q_p} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{r} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

w_{ij} : dato experimental i de la variable independiente j

\mathbf{x} : datos experimentales de la variable dependiente

$\hat{\mathbf{x}}$: vector de variable dependiente estimada

$\mathbf{r} = \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}$: vector de residuos

q_e : cantidad de experimentos

$\hat{\mathbf{p}}$: vector de parâmetros estimados

q_p : cantidad de parâmetros

$$\text{Función objetivo: } \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$$

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{0} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{p}_1} = 0 \\ \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{p}_2} = 0 \end{cases} \quad \begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &= (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \\ E\{\hat{\mathbf{p}}\} &= (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot E\{\mathbf{x}\} \end{aligned}$$

Se $E\{\mathbf{x}\} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{p} \Rightarrow E\{\hat{\mathbf{p}}\} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R}) \cdot \mathbf{p}$
 $E\{\hat{\mathbf{p}}\} = \mathbf{p}$, es decir, $\hat{\mathbf{p}}$ es un estimador insesgado (no sesgado) de \mathbf{p}

$$\mathbf{x} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot \mathbf{w}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

$$\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{q_e} x_i \\ \sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} = \begin{bmatrix} q_e & \sum_{i=1}^{q_e} w_i \\ \sum_{i=1}^{q_e} w_i & \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 \end{bmatrix}$$

Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1} = \frac{1}{q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 - (\sum_{i=1}^{q_e} w_i)^2} \cdot \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 & -\sum_{i=1}^{q_e} w_i \\ -\sum_{i=1}^{q_e} w_i & q_e \end{bmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 - (\sum_{i=1}^{q_e} w_i)^2} \cdot \begin{bmatrix} \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} x_i \right) - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i \right) \\ - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} x_i \right) + q_e \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i \right) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot \mathbf{w}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right)^2} \cdot \begin{bmatrix} \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i^2\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} x_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i\right) \\ - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} x_i\right) + q_e \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i\right) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \text{var}(\hat{p}_1) & \text{cov}(\hat{p}_1, \hat{p}_2) \\ \text{cov}(\hat{p}_1, \hat{p}_2) & \text{var}(\hat{p}_2) \end{bmatrix} = \sigma_x^2 \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R})^{-1}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \frac{\sigma_x^2}{q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right)^2} \cdot \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 & -\sum_{i=1}^{q_e} w_i \\ -\sum_{i=1}^{q_e} w_i & q_e \end{bmatrix} = \frac{\sigma_x^2}{\sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^{q_e} w_i^2}{q_e} & -\bar{w} \\ -\bar{w} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2 = \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2 - 2w_i \cdot \bar{w} + \bar{w}^2) = \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - 2\bar{w} \cdot \sum_{i=1}^{q_e} (w_i) + q_e \cdot \bar{w}^2 = \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - 2\bar{w} \cdot q_e \cdot \frac{\sum_{i=1}^{q_e} (w_i)}{q_e} + q_e \cdot \bar{w}^2 = \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - q_e \cdot \bar{w}^2$$

$$q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2 = q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - q_e^2 \cdot \bar{w}^2 = q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - q_e^2 \cdot \left(\frac{\sum_{i=1}^{q_e} w_i}{q_e}\right)^2 = q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - \frac{(\sum_{i=1}^{q_e} w_i)^2}{q_e} = q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} (w_i^2) - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right)^2$$

$$\mathbf{x} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot \mathbf{w}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{q_e \cdot \sum_{i=1}^{q_e} w_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right)^2} \cdot \begin{bmatrix} \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i^2\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} x_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i\right) \\ - \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} x_i\right) + q_e \cdot \left(\sum_{i=1}^{q_e} w_i \cdot x_i\right) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{V} \begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \text{var}(\hat{p}_1) & \text{cov}(\hat{p}_1, \hat{p}_2) \\ \text{cov}(\hat{p}_1, \hat{p}_2) & \text{var}(\hat{p}_2) \end{bmatrix} = \frac{\sigma_x^2}{\sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\sum_{i=1}^{q_e} w_i^2}{q_e} & -\bar{w} \\ -\bar{w} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{var}(\hat{p}_1) = \frac{\sigma_x^2 \cdot \left(\frac{\sum_{i=1}^{q_e} w_i^2}{q_e}\right)}{\sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2}$$

$$\text{var}(\hat{p}_2) = \frac{\sigma_x^2}{\sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2}$$

$$\text{cov}(\hat{p}_1, \hat{p}_2) = \frac{-\sigma_x^2 \cdot \bar{w}}{\sum_{i=1}^{q_e} (w_i - \bar{w})^2}$$

Variable centrada na media

- Disminuye la covarianza entre los parámetros que se estimarán
- $\omega = W - W_o$
- w_o es exacto
- w_o no tiene incertidumbre
- w_o , generalmente, igual a la media aritmética del resultado de medición $\rightarrow \omega = w - \bar{w}$

$$x_i = p_1 + p_2 \cdot (w_i - w_o) + r_i$$

$$x_i = p_1 - p_2 \cdot w_o + p_2 \cdot w_i + r_i$$

$$x_i = p'_1 + p_2 \cdot w_i + r_i \text{ donde } p'_1 = p_1 - p_2 \cdot w_o$$

por lo tanto p'_1 depende de p_2

pero p_1 independe de p_2



UFSB
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO SUL DA BAHIA



Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES

Regresión Ponderada

o

Mínimos Cuadrados Ponderados

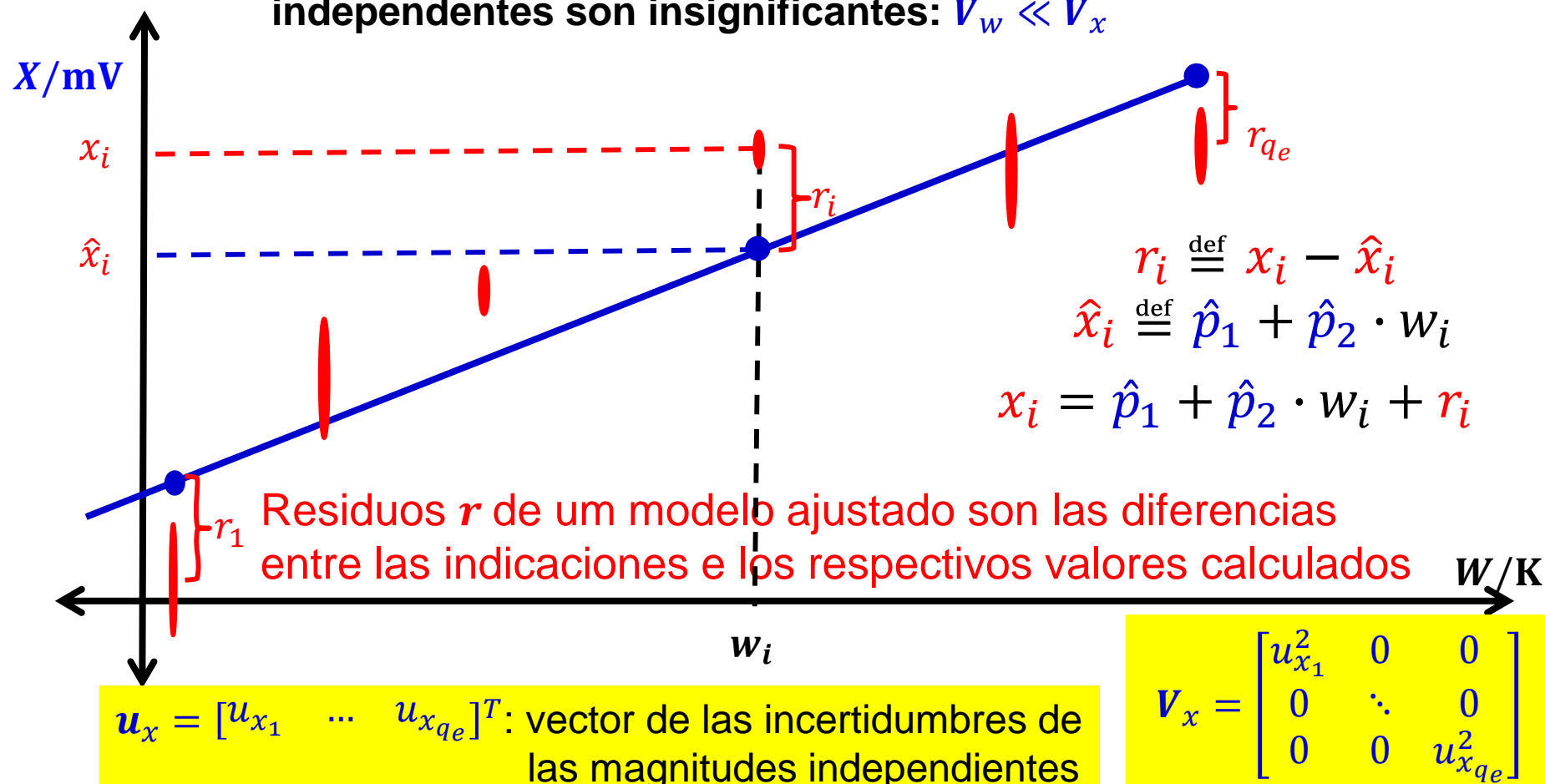
WLS – Weighted Least Square

Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES

Supuesto 1: un modelo lineal en los parámetros representa correctamente los datos experimentales: $X = p_1 + p_2 \cdot W$

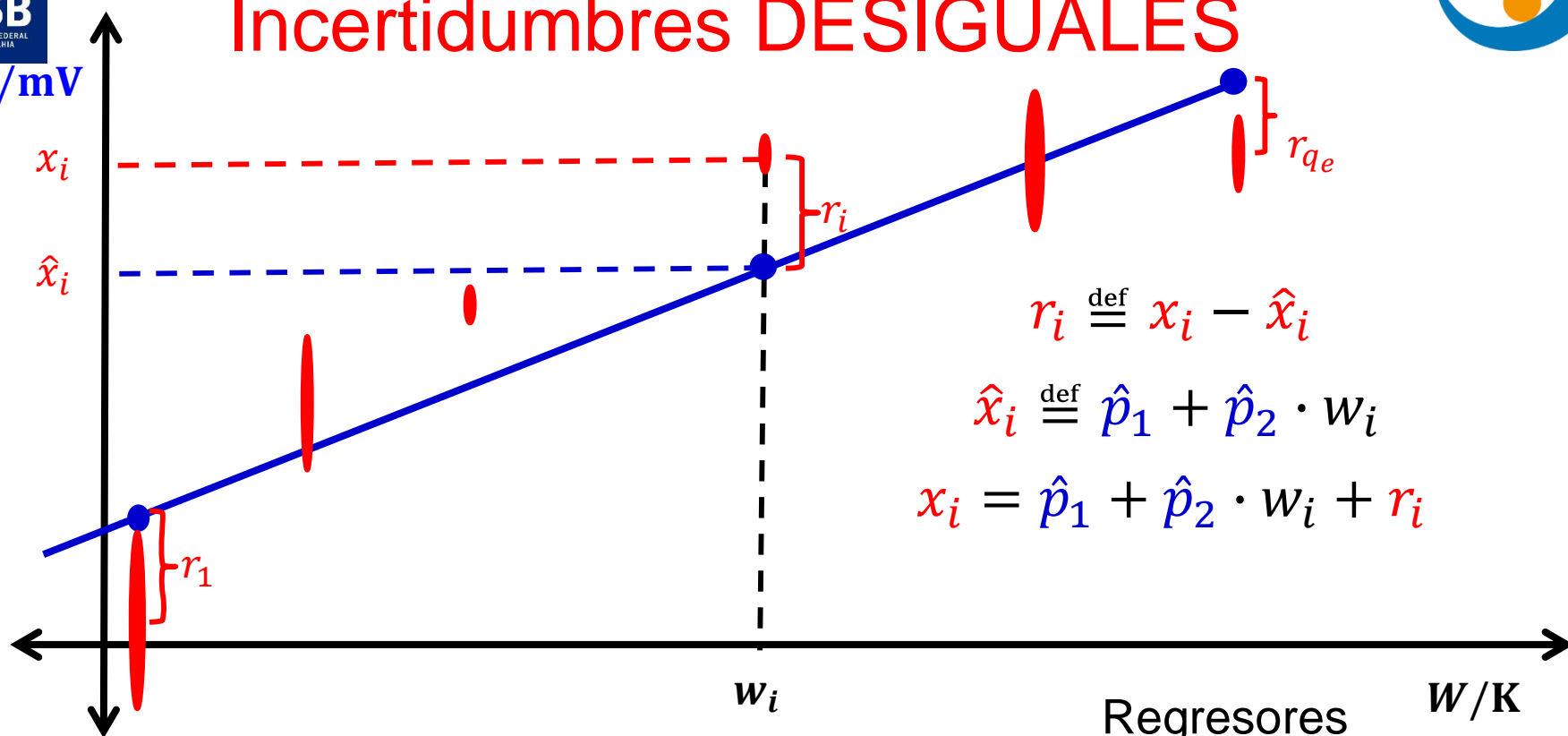
Supuesto 2: las incertidumbres de las variables dependientes son desiguales

Supuesto 3: las incertidumbres de las variables independientes son insignificantes: $V_w \ll V_x$



Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES

X/mV



$$r_i \stackrel{\text{def}}{=} x_i - \hat{x}_i$$

$$\hat{x}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i$$

$$x_i = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i + r_i$$

Hay q_e realizaciones experimentales:

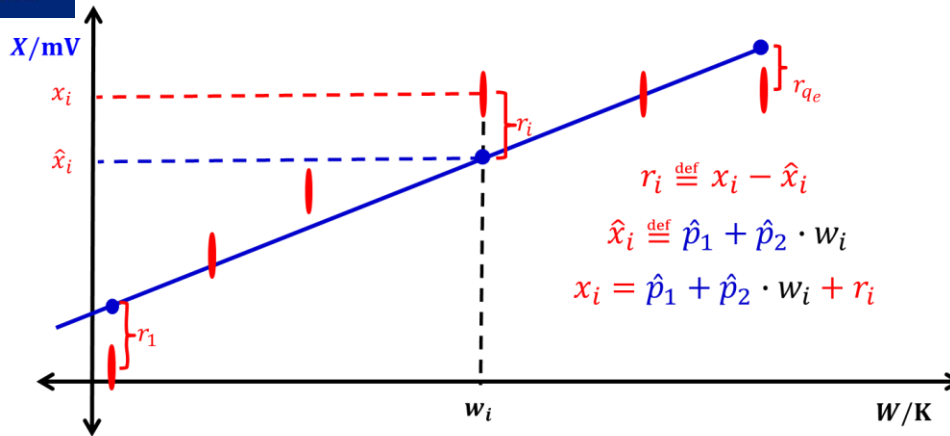
$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_1 + r_1 \\ x_2 = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_2 + r_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_{q_e} + r_{q_e} \end{array} \right\}$$

Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES



Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

Supuesto 1: $\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$

- Idealmente, todos los residuos de r_i deben ser cero, pero debido a las incertidumbres experimentales, esto nunca ocurre
- Por lo tanto, el objetivo puede ser minimizar la suma de los módulos de residuos, pero la función del módulo no es diferenciable
- Debido al **supuesto 2**, se debe considerar la incertidumbre de las magnitudes dependientes
- Debido al **supuesto 3** la incertidumbre de las magnitudes independientes no son consideradas
- Pero, la suma de los cuadrados de los residuos es diferenciable y tiene muy buenas propiedades estadísticas

Función objetivo: minimizar la suma de los cuadrados de los residuos ponderados:

$$\min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} \left(\frac{r_i}{u_{x_i}} \right)^2 \right\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} \frac{(x_i - (\hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i))^2}{u_{x_i}^2} \right\}$$

Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

Función objetivo: minimizar la suma de los cuadrados de los residuos

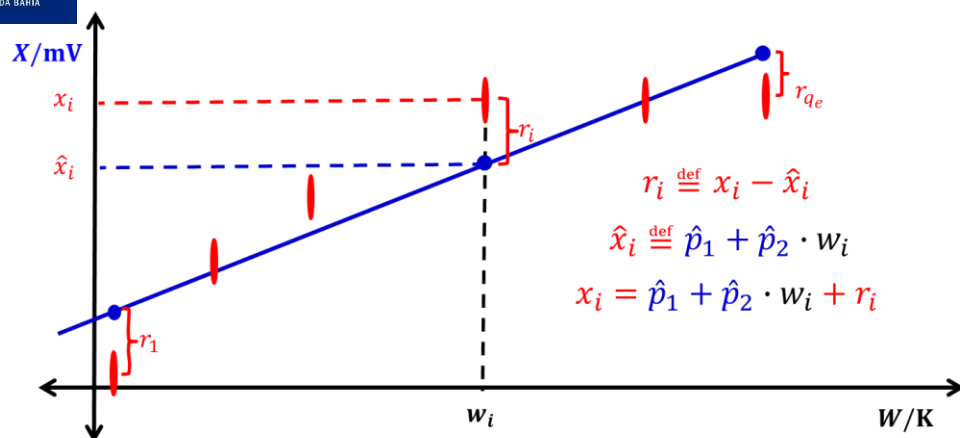
$$\min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} \left(\frac{r_i}{u_{x_i}} \right)^2 \right\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \left\{ \sum_{i=1}^{q_e} \frac{(x_i - (\hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i))^2}{u_{x_i}^2} \right\}$$

Podemos reescribir con álgebra matricial la función:

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = \sum_{i=1}^{q_e} \left(\frac{r_i}{u_{x_i}} \right)^2 = \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{r} = (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})$$

Función objetivo: $\min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$

Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES



Regresores

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{q_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}$$

Función objetivo: $\min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$

Sin restricciones \rightarrow solución: primera derivada igual a cero

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{0} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{p}_1} = 0 \\ \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{p}_2} = 0 \end{array} \right\}$$

Gradiente de $F(\mathbf{p}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = 0$

$$\nabla_{\mathbf{p}} F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = \mathbf{0}$$

Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES

Función objetivo: $\min_{\hat{\mathbf{p}}} \{F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})\} = \min_{\hat{\mathbf{p}}} \{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})\}$

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})$$

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = (\mathbf{x}^T - \hat{\mathbf{p}}^T \cdot \mathbf{R}^T) \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})$$

$$F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R}) = \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}^T \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} + \hat{\mathbf{p}}^T \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}$$

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{0} - \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} + 2 \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}} = -2 \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} + 2 \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0} \Rightarrow (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R}) \cdot \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x}$$

$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} \quad \frac{\partial^2 F(\hat{\mathbf{p}}; \mathbf{x}, \mathbf{R})}{\partial \hat{\mathbf{p}}^2} = 2 \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R} > \mathbf{0} \Rightarrow \hat{\mathbf{p}} \text{ es mínimo}$$

Supuesto 1: un modelo lineal en los parámetros representa correctamente los datos experimentales, $\hat{\mathbf{x}}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i$

Supuesto 2: las incertidumbres de las variables dependientes son desiguales

Supuesto 3: las incertidumbres de las variables independientes son insignificantes, $\mathbf{V}_w \ll \mathbf{V}_x$

Supuesto 4: $\exists (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R})^{-1}$

Álgebra matricial

$$a) \quad \frac{\partial b^T \cdot x}{\partial x} = b$$

$$b) \quad \frac{\partial x^T \cdot b}{\partial x} = b$$

$$c) \quad \frac{\partial (x^T \cdot A \cdot z)}{\partial x} = A \cdot z$$

$$d) \quad \frac{\partial (x^T \cdot A \cdot x)}{\partial x} = A \cdot x + A^T \cdot x$$

$$e) \quad \frac{\partial^2 (x^T \cdot A \cdot x)}{\partial x^2} = (A + A^T)$$

Si la matriz A es simétrica:

$$f) \quad \frac{\partial (x^T A \cdot x)}{\partial x} = 2 A \cdot x$$

$$g) \quad \frac{\partial^2 (x^T A \cdot x)}{\partial x^2} = 2 A$$

$$h) \quad \text{Si } \exists A^{-1}$$

$$\rightarrow (A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$$



Incertidumbre de los parámetros estimados



$$\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} \Rightarrow E\{\hat{\mathbf{p}}\} = E\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\hat{\mathbf{p}} - E\{\hat{\mathbf{p}}\}) \cdot (\hat{\mathbf{p}} - E\{\hat{\mathbf{p}}\})^T\} = E\{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - E\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - E\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{x}\})^T\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = E\{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{A} \cdot E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A}^T - E\{\mathbf{x}\}^T \cdot \mathbf{A}^T)\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = E\{\mathbf{A} \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x}^T - E\{\mathbf{x}\}^T) \cdot \mathbf{A}^T\} = E\{\mathbf{A} \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^T \cdot \mathbf{A}^T\}$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{A} \cdot E\{(\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\}) \cdot (\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^T\} \cdot \mathbf{A}^T = \mathbf{A} \cdot \mathbf{V}_x \cdot \mathbf{A}^T$$

$$\mathbf{V}_{\hat{\mathbf{p}}} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{V}_x \cdot \mathbf{A}^T$$

$$\mathbf{A} = (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1} \cdot \mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}_x^{-1}$$

La varianza (incertidumbre) de los parámetros estimados depende de la varianza experimental (incertidumbre) de las variables dependientes.

σ_r : incertidumbre de residuos

$$\mathbf{r} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}$$

$$E\{\mathbf{r}\} = E\{\mathbf{x}\} - E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\} = E\{\mathbf{x}\} - \mathbf{R} \cdot E\{\hat{\mathbf{p}}\} = E\{\mathbf{x}\} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p}$$

$$V\{\mathbf{r}\} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\mathbf{r} - E\{\mathbf{r}\})^2\}$$

$$\text{Mas } E\{\mathbf{r}\} = \mathbf{0} \Rightarrow V\{\mathbf{r}\} = E\{\mathbf{r}^2\}$$

$$V\{\mathbf{x}\} \stackrel{\text{def}}{=} E\{(\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^2\} = E\{(\mathbf{x} - E\{\mathbf{x}\})^2\} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p})^2\}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r} \Rightarrow E\{\mathbf{x}\} = E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{r}\} = E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\} + E\{\mathbf{r}\} = E\{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}\} = \mathbf{R} \cdot E\{\hat{\mathbf{p}}\} =$$

$$\text{Se } \hat{\mathbf{p}} \cong \mathbf{p} \Rightarrow (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \cong (\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{r}$$

$$V\{\mathbf{x}\} = E\{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{p})^2\} \cong E\{(\mathbf{x} - \mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2\} = E\{\mathbf{r}^2\} = V\{\mathbf{r}\}$$

$V\{\mathbf{x}\} \cong V\{\mathbf{r}\} \Rightarrow$ La varianza (incertidumbre) de los residuos puede ser aproximada por la varianza (incertidumbre) de las variables dependientes

Calibración Unidireccional con Incertidumbres DESIGUALES



Supuesto 1: un modelo lineal en los parámetros representa correctamente los datos experimentales, $\hat{x}_i \stackrel{\text{def}}{=} \hat{p}_1 + \hat{p}_2 \cdot w_i$

Supuesto 2: las incertidumbres de las variables dependientes son desiguales: $V_x \neq u_x^2 \cdot I$

Supuesto 3: las incertidumbres de las variables independientes son insignificantes: $V_w \ll V_x$

Supuesto 4: $\exists (R^T \cdot V_x^{-1} \cdot R)^{-1}$

$$x = R \cdot \hat{p} + r$$

$$\hat{p} = A \cdot x$$

$$R = \begin{bmatrix} 1 & w_1 \\ 1 & w_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w_{q_e} \end{bmatrix}$$

$$V_{\hat{p}} = A \cdot V_x \cdot A^T$$

$$A = (R^T \cdot V_x^{-1} \cdot R)^{-1} \cdot R^T \cdot V_x^{-1}$$

¡Vamos a practicar!

Calibración Unidireccional

Practica: Calibración unidireccional

Archivo: 7_Calibracion_unidireccional.xlsx

Procedimiento sugerido para calibración:

- 1) Establecer los objetivos de la calibración
- 2) Conocer el mensurando
- 3) Conocer el sistema de medida
- 4) Establecer la forma de la curva de calibración (función de calibración)
- 5) Realizar los experimentos y identificar las indicaciones, su unidad, el sistema de medición, la fecha, el horario y el lugar de los experimentos, el experimentador, el técnico responsable, el certificado de calibración del instrumento de referencia (patrón), los registradores de datos, el software aprobado que se utilizará; otra información según sea necesario; fecha, hora, ubicación de los cálculos de incertidumbre
- 6) Evaluar y seleccionar indicaciones en régimen permanente
- 7) Eliminar los puntos experimentales divergentes
- 8) Realizar cálculos para obtener los parámetros de la curva de calibración
- 9) Avaliar la matriz de covarianza del parámetros; se es diagonal avaliar la incertidumbre estándar del parámetro
- 10) Identificar las fuentes más importantes de incertidumbre
- 11) Decidir si la calibración y sus incertidumbres son apropiadas
- 12) Obtener las función(ones) de medición (función inversa de la curva de calibración);
- 13) Informar y verificar que el resultado de la calibración y su incertidumbre cumplan con las especificaciones.



UFSB
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO SUL DA BAHIA



Calibración bidireccional: Simultanea estimación de parámetros y reconciliación de datos

Calibración Bidireccional

Calibración bidireccional

- Otras denominaciones:
 - Error instrumental: no utilizo debido la palabra “error”
 - Error en las variables independientes: no utilizo debido la palabra “error”
 - Regresión ortogonal o OLS ortogonal (*Orthogonal Least Square*): es o método de solución, no descripción del problema
- Vatajes de usar la denominación “unidireccional” e “bidireccional”:
 - Existe as palabras “unidireccional” e “bidireccional”
 - Presenta una relación geométrica con el escenario



UFSB
UNIVERSIDADE FEDERAL
DO SUL DA BAHIA

Calibración Bidireccional



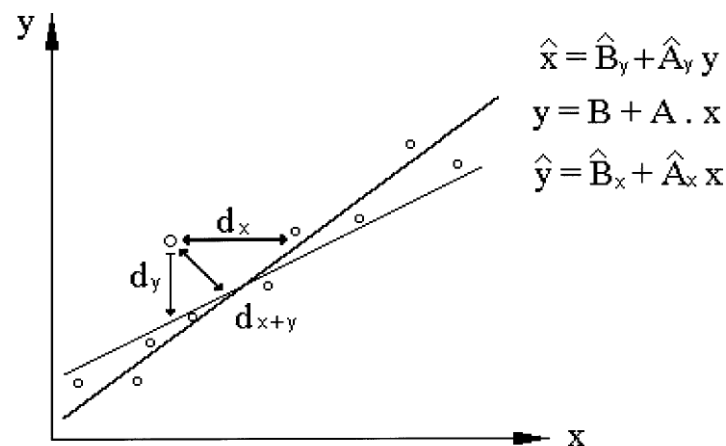
- Si la incertidumbre del instrumento de referencia (patrón) está cerca de la incertidumbre del instrumento a calibrar (objeto) no se puede utilizar regresión lineal
- Soluciones:
 - (i) Hacer nuevo experimento con instrumentos de referencia (patrón) con incertidumbre 10 x más pequeño que la incertidumbre del objeto
 - (ii) Eliminar cifras decimales de las indicaciones del objeto
 - (iii) Curva de calibración bidireccional intermedia entre dos curvas de calibración unidireccionales,
 - (iv) Propagar la incertidumbre de las medidas del patrón para las medidas del objeto;
 - (v) Hacer simultáneamente la estimación de parámetros e la reconciliación de datos.

(iii) Curva de calibración bidireccional intermedia entre dos curvas de calibración unidireccionales

Fig. 3 Different linear least squares models.

\hat{B}_y , \hat{B}_x , \hat{A}_y , and \hat{A}_x

are the estimates of B_y , B_x , A_y , and A_x



- Referencia: IUPAC Recommendations 1998. **GUIDELINES FOR CALIBRATION IN ANALYTICAL CHEMISTRY - PART 1: FUNDAMENTALS AND SINGLE COMPONENT CALIBRATION.** Prepared for publication by Klaus Danzer & Lloyd A. Currie

Procedimiento

- 1) Tomar un valor para la incertidumbre de calibración del objeto u_{X_k}
- 2) Calcule la incertidumbre estándar de las indicaciones experimentales
- 3) Realice la calibración unidireccional, obtener p_{1_k} y p_{2_k}
- 4) Utilizando la curva de calibración ($X = p_{1_k} + p_{2_k} \cdot W$) de la etapa 1, propague la incertidumbre de la magnitud independiente (W) a la incertidumbre de la magnitud dependiente (X):

$$u_{X_{k+1}} = \sqrt{\left(\frac{\partial X}{\partial p_{1_k}}\right)^2 \cdot u_{p_{1_k}}^2 + \left(\frac{\partial X}{\partial p_{2_k}}\right)^2 \cdot u_{p_{2_k}}^2 + \left(\frac{\partial X}{\partial W}\right)^2 \cdot u_W^2}$$

$$u_{X_{k+1}} = \sqrt{1 \cdot u_{p_{1_k}}^2 + (\bar{W})^2 \cdot u_{p_{2_k}}^2 + (p_{2_k})^2 \cdot u_W^2} = \sqrt{u_{p_{1_k}}^2 + (p_{2_k})^2 \cdot u_W^2}$$

LPI para p_{1_k} y p_{2_k} no correlacionados y datos centrados en la media

- 5) Calcule el criterio de convergencia: $|u_{X_{k+1}} - u_{X_k}|$
- 6) Hazlo $u_{X_k} \leftarrow u_{X_{k+1}}$
- 7) Regrese a la etapa 2 hasta que el criterio de convergencia sea alcanzado

Procedimiento sugerido para calibración bidireccional pelo método de la curva intermedia:

- 1) Establecer los objetivos de la calibración bidireccional
- 2) Conocer el mensurando
- 3) Conocer el sistema de medida
- 4) Establecer la forma de la curva de calibración (función de calibración)
- 5) Realizar los experimentos y identificar las indicaciones, su unidad, el sistema de medición, la fecha, el horario y el lugar de los experimentos, el experimentador, el técnico responsable, el certificado de calibración del instrumento de referencia (patrón), los registradores de datos, el software aprobado que se utilizará; otra información según sea necesario; fecha, hora, ubicación de los cálculos de incertidumbre
- 6) Evaluar y seleccionar indicaciones en régimen permanente
- 7) Eliminar los puntos experimentales divergentes
- 8) Comprobar si la incertidumbre estándar de la magnitud independiente es mucho menor que la incertidumbre estándar de la magnitud dependiente; si es hacer calibración unidireccional, si no es proseguir a etapa (9)
- 9) Realizar cálculos para obtener los parámetros de la curva de calibración unidireccional en las dos direcciones
- 10) Calcular el coeficiente angular de la curva de calibración intermedia (eq. 47 IUPAC 2003), y obtener el coeficiente linear (eq. 20, IUPAC 2003)
- 11) Propagar la incertidumbre para los coeficientes angular e linear, para hacerlo use la LPI
- 12) Decidir si la calibración y sus incertidumbres son apropiadas
- 13) Obtener las función(ones) de medición (función inversa de la curva de calibración);
- 14) Informar y verificar que el resultado de la calibración y su incertidumbre cumplan con las especificaciones.

Practica: Calibración bidireccional & LPI

Archivo: 9_Calibracion_bidireccional.xlsx

Procedimiento sugerido para calibración bidireccional pelo método de la curva intermedia:

- 1) Establecer los objetivos de la calibración bidireccional
- 2) Conocer el mensurando
- 3) Conocer el sistema de medida
- 4) Establecer la forma de la curva de calibración (función de calibración)
- 5) Realizar los experimentos y identificar las indicaciones, su unidad, el sistema de medición, la fecha, el horario y el lugar de los experimentos, el experimentador, el técnico responsable, el certificado de calibración del instrumento de referencia (patrón), los registradores de datos, el software aprobado que se utilizará; otra información según sea necesario; fecha, hora, ubicación de los cálculos de incertidumbre
- 6) Evaluar y seleccionar indicaciones en régimen permanente
- 7) Eliminar los puntos experimentales divergentes
- 8) Comprobar si la incertidumbre estándar de la magnitud independiente es mucho menor que la incertidumbre estándar de la magnitud dependiente; si es hacer calibración unidireccional, si no es proseguir a etapa (9)
- 9) Calcular la curva de calibración unidireccional
- 10) Propagar la incertidumbre estándar de la magnitud independiente para la incertidumbre de la magnitud dependiente, para hacerlo use los parámetros obtenidos en el paso anterior
- 11) Repita los pasos (9) y (10) hasta lograr la convergencia
- 12) Decidir si la calibración y sus incertidumbres son apropiadas
- 13) Obtener las función(ones) de medición (función inversa de la curva de calibración);
- 14) Informar y verificar que el resultado de la calibración y su incertidumbre cumplan con las especificaciones.



REGIONAL FUND QUALITY INFRASTRUCTURE FOR BIODIVERSITY & CLIMATE PROTECTION
IN LATIN AMERICA AND THE CARIBBEAN

Workshop on Statistics, data analysis and measurement uncertainty for Meteorology

Fundamentos estadísticos para la evaluación de la incertidumbre en las calibraciones



Márcio A. A. Santana – INPE/BR
marcio.santana@inpe.br

Ricardo de A. Kalid – UFSB/BR
kalid@ufsb.edu.br



TECLIM-UFSB