

VALORES INTERPOLADOS MEDIANTE UN MÉTODO MATRICIAL PARA MATERIALES DE REFERENCIA

Gabino Estevez-Delgado^{1*}, Joaquin Estevez-Delgado, Ximena Ramos-Zamora² y Ángel Hernández-Montiel²

¹Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

²Centro de Innovación y Desarrollo Agroalimentario de Michoacán

*gabino.estevez@umich.mx

Resumen

Ligado a la referencia ISO 17025, aplicable a los laboratorios acreditados para realizar ensayos o calibraciones a nivel internacional en México, se requiere el cumplimiento de las normatividades nacionales lo que genera una serie de requisitos tanto de carácter metrológico legal como científico. De los laboratorios secundarios, cuyo requisito es cumplir con la referencia ISO 17025, deben cumplir con la trazabilidad al Sistema Internacional de Unidades. Así mismo, con los servicios de calibración mantienen esa trazabilidad, que de acuerdo con la ley de grandes números requieren únicamente del error de medición y la incertidumbre, mismos que se reportan en los certificados de los materiales de referencia. Sin embargo, no siempre los laboratorios que prestan sus servicios de calibración acreditados ante el organismo acreditador tienen patrones de referencia que les permitan comparar valores para poder prestar sus servicios. Una forma de sortear la imposibilidad de generar la trazabilidad es la interpolación. Los certificados de calibración requieren entregar valores tanto de incertidumbre y de errores de medición, lo que requiere analizar ambos valores al mismo tiempo. En el presente trabajo se consideraron calibradores de materiales ópticos, siendo necesario un análisis de estos parámetros conjuntos, lo que en primera instancia requiere un análisis polinomial para la absorbancia o transmitancia. Lo más representativo que se requiere en el análisis conjunto de valores es el error de medición e incertidumbre, considerando el número de inflexiones en las curvas polinomiales. El impacto en este análisis repercutió en el

aumento en los de grados de libertad y con ello mejores parámetros de normalidad en los resultados, particularmente de importante condición en los materiales de referencia ópticos.

Palabras clave: Material de referencia, interpolación, certificados de calibración, modelo lineal.

Introducción

Cuando hablamos de servicios de calidad de manera inmediata viene a nuestra mente la generación de la variabilidad más mínima posible. El concepto de la calidad moderno define que la calidad es inversamente proporcional a la variabilidad, lo que implica que una pequeña variabilidad podrá generar una buena calidad, en tanto, si la variabilidad crece, la calidad disminuye. Este concepto de la relación inversa nos conduce a la búsqueda de técnicas que permitan mejorar la variabilidad, con lo que incorporan otra serie de conceptos estadísticos que apoyan a los aspectos metrológicos inherentes a los servicios (Montgomery, 2019).

Desde el punto de vista de la metrología científica, alrededor de la calidad, se encuentran dos conceptos: el primero de los conceptos es el de la homogeneidad, donde las mediciones indican que los materiales o los instrumentos mantienen mediciones con mínima variabilidad; el segundo concepto es el de isotropía, este ligado a la búsqueda de materiales que mantienen sus condiciones estables a lo largo del tiempo (Velychko & Gordiyenko, 2019).

Para poder generar materiales de referencia con características metrológicas buenas, tales como una buena homogeneidad e isotropía, requieren que al momento de la validación de la generación de materiales de referencia puedan tener las mejores condiciones (Dirección General de Normas, 2018a).

Aun cuando los materiales de referencia puedan cubrir algunos valores con trazabilidad al sistema internacional de unidades, difícilmente puede cubrir todos los valores que el mercado comercial puede requerir. Las necesidades del mercado, en cualquier magnitud,

demanda muchos más valores que los que el sistema metrológico nacional de cualquier país puede tener (Montgomery, 2019). A fin de garantizar la trazabilidad, además de la homogeneidad y la isotropía, se realiza un análisis sobre los materiales de referencia o los principios físicos de los materiales o de las leyes físicas que gobiernan los fenómenos del material (Dirección General de Normas, 2023).

Los servicios de calibración y caracterización que los laboratorios primarios o secundarios dan cumplimiento de la referencia ISO 17025 y dentro de los requisitos es garantizar la trazabilidad de las mediciones reportadas en un informe de calibración, para ello, se requiere tenga los valores reportados en su sistema (Dirección General de Normas, 2018b). Mientras los valores solicitados por algún cliente se encuentren dentro del alcance de los valores mantenidos por cada laboratorio, se puede recurrir a métodos de interpolación.

El recurso de la interpolación requiere considerar valores conocidos, generalmente, asociados al alcance de los valores trazables. Sin embargo, la interrogante es si el tratamiento de los datos puede heredar información conjunta, si pensamos que los valores dados deben responder al mismo tiempo tanto a la incertidumbre y a error de medición. Una alternativa útil es la interpolación matricial a fin de evaluar al sistema mismo, considerando la cercanía de los valores a interpolar Liu *et al.*, 2019).

Objetivo

Obtener valores interpolados a partir de materiales de referencia conocidos, tomando en consideración el comportamiento polinomial, tanto para la incertidumbre y el error de medición, a fin de garantizar la trazabilidad de los valores al sistema internacional de unidades.

Materiales y métodos

Materiales

- Espectrofotómetro Cary 5000

- Material de referencia óptica neutra.

Metodología

- Se considera el conjunto de valores reportados en el certificado de calibración trazables al sistema internacional de unidades.
- Dado que el valor reportado en los certificados no existe se recurre a la interpolación polinomial, considerando el comportamiento polinomial de los valores reportados alrededor del valor solicitado.
- Se evalúa con los valores conocidos, tanto de manera teórica o experimental a través de las mediciones realizadas en el espectrofotómetro, a fin de verificar que el algoritmo está funcionando de manera adecuada.

Las técnicas de interpolación generadas, como es el caso de método de mínimos cuadrados, parte de la idea poder optimizar el sistema más eficiente que permitan la homocedasticidad de las mediciones (Burden & Duglas, 2016).

Cada una de las ecuaciones que intervienen dentro de un sistema lineal está dada de la forma:

$$Y = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_k x_k + \varepsilon \quad (1)$$

al generalizarlo para construir un sistema podemos considerarlo, con n observaciones, independientes y_1, \dots, y_n de Y .

$$y_i = \alpha_0 + \alpha_1 x_{i1} + \alpha_2 x_{i2} + \dots + \alpha_k x_{ik} + \varepsilon_i, \quad (2)$$

donde x_{ij} es el valor de la j -ésima variable independiente para la i -ésima observación, $i = 1, \dots, n$.

Generalizando la ecuación (2) a una forma matricial podemos obtener las siguientes ecuaciones, tanto para los valores matriciales de la matriz x y de los vectores de los coeficientes del sistema y de los errores de la medición:

$$Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}; \quad X = \begin{bmatrix} x_0 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_0 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ x_0 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nk} \end{bmatrix}; \quad (3)$$

$$\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_k \end{bmatrix}; \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix};$$

Considerando el campo matricial de manera generalizada, esto puede ser expresado como:

$$Y = X\alpha + \varepsilon, \quad (4)$$

Tomando los valores considerados en la ecuación (3), con $x_0 = 1$, por otro lado, tomando en cuenta que el valor esperado para el valor del error este tiende a ser pequeño, por lo que podemos prescindir de él.

Así mismo, el sistema puede generalizarse al método matricial de tal forma que en la ecuación (4):

$$Y = AX \quad (5)$$

Al multiplicar por la matriz transpuesta de ambos lados de la ecuación (5) tenemos:

$$A^T Y = A^T A X \quad (6)$$

Al tomar en consideración que la matriz $A^T A$ es cuadrada, esperamos que la matriz tiene inversa, por lo que podemos despejar X , al multiplicar por $(A^T A)^{-1}$, obtenemos:

$$X = (A^T A)^{-1} (A^T Y) \quad (7)$$

Tomando los siguientes valores de referencia.

Tabla 1. Valores de referencia certificado (Elaboración propia).

LONGITUD DE ONDA (nm)	INCERTIDUMBRE	ERROR
880.15	0.24	0.06
807.51	0.19	-0.19
741.19	0.19	0.59
685.70	0.20	0.75
586.63	0.18	0.70

Tomando la expresión para cada polinomio de cada longitud de onda, esta es dada como:

$$p(x) = a_{i0} + a_{i1}x + a_{i2}x^2 + a_{i3}x^3 + a_{i4}x^4 \quad (8)$$

Con $i = 1, \dots, 5$.

Por lo que se obtiene la siguiente matriz.

Tabla 2. Valores obtenidos para la expresión polinomial (Elaboración propia).

LONGITUD DE ONDA	INCERTIDUMBRE	ERROR	a0	a1	a2	a3	a4
880.15	0.24	0.06	1	880.15	774664.0225	681820539.4	6.00104E+11
807.51	0.19	-0.19	1	807.51	652072.4001	526554983.8	4.25198E+11
741.19	0.19	0.59	1	741.19	549362.6161	407182077.4	3.01799E+11
685.70	0.20	0.75	1	685.7	470184.49	322405504.8	2.21073E+11
586.63	0.18	0.70	1	586.63	344134.7569	201879772.4	1.18429E+11

Resultados

Tomando como matriz A con los valores de los coeficientes de los polinomios, y los valores de la matriz Y como los valores conformados como la incertidumbre y error de medición. De tal forma que la solución obtenida se da como (Tabla 3).

Tabla 3. Valores obtenidos para la solución interpolada (Elaboración propia).

LONGITUD DE ONDA	VALOR PARA LA INCERTIDUMBRE	VALOR PARA EL ERROR
880.15	-6.286872406	1018.542113
807.51	0.027530651	-5.79200383
741.19	-3.87432E-05	0.012267655
685.70	1.81265E-08	-1.1458E-05
586.63	-8.37892E-14	3.97984E-09

Al sustituir el valor de la incertidumbre o error de medición para cada valor interpolado de la ecuación (8) se determina el valor incógnita.

Discusión

Los valores encontrados por interpolación permiten determinar de manera inmediata los valores para el sistema considerado en los certificados, lo que ofrece la ventaja de poder entregar un valor conjunto. Puede adicionalmente generar alguna otra propiedad del material siempre y cuando los valores del material de referencia formen parte de un sistema normalizado, donde el error se minimice como parte del valor esperado en la reducción de los errores.

Conclusión

Se observa que la obtención de valores interpolados por el método matricial, para el caso de materiales de referencia, supone una posibilidad en la evaluación de valores de manera dicotómica tanto para la incertidumbre como al error de medición. El propio Centro Nacional de Metrología llega a utilizar métodos para poder tener valores interpolados e inclusive valores extrapolados, acompañándolos de principios biológicos, físicos o químicos del fenómeno que acompaña al principio de medición (CENAM, 2004). Sean métodos de interpolación con algoritmos de una variable dependiente de otra variable, tal como el método de mínimos cuadrados, Newton, Newton-Lagrange siempre estará presente la convergencia numérica (Burden & Duglas, 2016). Aunado a lo anterior, surgen interrogantes de las interpolaciones cuando un valor interpolado depende de

varias variables independientes. Un análisis matricial abre las posibilidades de manejar al mismo tiempo varias variables que, acompañado con métodos estadísticos, como el método de mínimos cuadrados, pueden generar buenos resultados. Como se observa en el estudio realizado, se puede obtener al mismo tiempo la obtención de error de medición e incertidumbre, pero deja abierta la posibilidad de analizar a la par valores de diferente característica para el material. Es importante resaltar que la valoración polinomial, expresada en la ecuación polinomial (8), debe ser considerada para una buena aproximación de interpolación. En el caso del material se consideró un polinomio de grado cuatro, siendo clave para la obtención del modelo interpolante.

Agradecimientos

Agradecemos el apoyo brindado por el laboratorio de Biofísica del Instituto de Física y Matemáticas de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. Así como la Coordinación de Investigación Científica por los apoyos otorgados para llevar a cabo la investigación.

Referencias

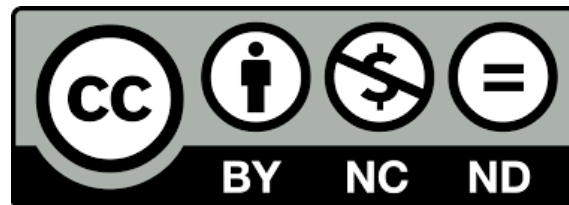
- Burden, R. L., & Douglas, F. (2016). *Análisis numérico*. Cengage Learning.
- Dirección General de Normas. (2003). *NMX-CH-140-IMNC-2002. GUÍA PARA LA EXPRESIÓN DE INCERTIDUMBRE EN LAS MEDICIONES*. IMNC.
- Dirección General de Normas. (2018 a). *NMX-EC-17034-IMNC-2018, "REQUISITOS GENERALES PARA LA COMPETENCIA DE LOS PRODUCTORES DE MATERIALES DE REFERENCIA (CANCELA A LA NMX-CH-164-IMNC-2012)"*. IMNC.
- Dirección General de Normas. (2018 b). *NMX-EC-17025-IMNC-2018. Requisitos generales para la competencia de los laboratorios de ensayo y calibración*. IMNC.
- Liu, Y., Du, H., Li, H., Li, F., & Sun, W. (2019). An improved method for parametric model order reduction by matrix interpolation. *Journal of Vibration Engineering & Technologies*, 7, 603-610.
- Montgomery, D. C. (2019). *Introduction to statistical quality control*. John Wiley & Sons.
- Velychko, O., & Gordiyenko, T. (2019). Metrological traceability at different measurement levels. In *Standards, Methods and Solutions of Metrology*. IntechOpen. *IntechOpen*.



D. R. © UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO.

Excepto donde se indique lo contrario esta obra está bajo una licencia Creative Commons Atribución No comercial, No derivada, 4.0 Internacional (CC BY NC ND 4.0 INTERNACIONAL).

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>



ENTIDAD EDITORA

Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán.

Av. Universidad 3000, Universidad Nacional Autónoma de México, C.U., Delegación Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México.

FORMA SUGERIDA DE CITAR:

Estevez-Delgado, G., Estevez-Delgado, J., Ramos-Zamora, X., y Hernández-Montiel, A. (2023). Valores interpolados mediante un método matricial para materiales de referencia. *MEMORIAS DEL CONGRESO NACIONAL DE TECNOLOGÍA (CONATEC)*, Año 6, No. 6, septiembre 2023 - agosto 2024. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. UNAM.

https://tecnicosacademicos.cuautitlan.unam.mx/CongresoTA/memorias2023/Mem2023_Paper24-EC.html