Herramientas computacionales libres aplicadas a los cálculos de propagación de incertidumbre utilizando la "GUM" y simulaciones de Monte-Carlo: ejemplo del cálculo de la densidad del aire.

Jesus Carlos Sánchez Ochoa (*†), Christian Bouchot (*) y José Luis Castro Quilantán(**)
Instituto Politécnico Nacional
* ESIQIE Edif 7 PB UPALM Zacatenco Lindavista CP07738, México D.F.
** ESFM Edif 9 PB UPALM Zacatenco Lindavista CP07738, México D.F.
†: (525) 57296000 ext. 55392, jcsanchezochoa@yahoo.com

Resumen

Actualmente el software libre está adquiriendo una gran popularidad en el ámbito universitario. La excelente calidad que uno encuentra en este software lo hace una herramienta muy valiosa para enfrentar problemas de cálculo complejos y rutinarios como los que existen en metrología.

En este trabajo se presenta la aplicación de herramientas computacionales libres como "Octave" [1] y "Wxmaxima" [2] para resolver de una manera eficiente y rápida de problemas de metrología permitiendo la enseñanza de cálculos complejos a nivel de licenciatura. Se muestra el cálculo de la densidad del aire que tiene una aplicación muy importante en metrología de masas donde es necesario conocer esta variable a diferentes temperaturas, presiones atmosféricas y de humedad, calculándose ésta con la ecuación conocida como CIPM-81/91 [3].

El ejemplo se presta para aplicar la fórmula de propagación de la incertidumbre de la Guía para la Expresión de la Incertidumbre en la Medición, "GUM" por sus siglas en inglés [4] y se hace la verificación de la incertidumbre calculada de la densidad del aire con el método de "Monte Carlo" [5, 6]. Esto constituye un excelente ejercicio para la formación de los estudiantes interesados en el campo de la metrología [10].

1 Introducción

El cálculo de la densidad del aire es necesario, entre otras aplicaciones, para la calibración volumétrica de un matraz [7] que también se usa como ejemplo entre los estudiantes de licenciatura. El trabajo sigue muy de cerca los cálculos hechos en dos artículos del CENAM [8, 9] que ilustran de una manera muy pedagógica, la propagación de incertidumbres en el cálculo de la densidad del aire. En particular la referencia [8] tiene la ventaja de llevar al lector paso a paso en los cálculos de todas las fuentes de incertidumbre que contribuyen en la incertidumbre de la densidad del aire. El software libre ayuda a calcular los coeficientes de sensibilidad y las derivadas parciales necesarias en la fórmula de propagación de la incertidumbre.

En este trabajo se muestra cómo la parte analítica involucrada en la "fórmula de propagación de incertidumbres" que maneja la "GUM", incluyendo la posibilidad de tener acceso rápido a las correcciones de orden superiores a 1 en las expansiones de las esperanzas matemáticas de los mesurandos involucrados, se genera mediante el programa wxMaxima, utilizando un cálculo vectorial compacto, y un acceso rápido a los valores numéricos.

2 Los cálculos en EXCEL®

En esta parte del trabajo se utilizó Excel para calcular fácilmente la densidad del aire como aparece reportada en la publicación del CENAM [8], mediante la siguiente ecuación:

$$d_a = \frac{p\,M_a}{Z\,RT}\left(1 - x_v\left(1 - \frac{M_v}{M_a}\right)\right)$$

donde p es la presión atmosférica, T la temperatura, Z la compresibilidad y x_v la fracción molar del vapor de agua. Las constantes R, M_a y M_v son respectivamente la constante universal de los gases, la masa molar del aire seco y del agua.

Excel es una herramienta tradicional para llevar a cabo los cálculos mencionados. Existen alternativas libres de alta calidad a esta "hoja de cálculo", como Gnumeric u OpenOffice-Calc, y que pueden ser usadas como herramientas de cálculo para la ingeniería. En general, las "hojas de cálculo" permiten manipular una cantidad grande de datos sin demasiados problemas bajo la condición de tener aparte los cálculos analíticos formales hechos y listos para ser programados directamente en la hoja de cálculo. Las derivadas parciales a diversos órdenes del modelo considerado que aparecen en la formula de propagación de la "GUM" deben ser previamente calculadas. Se requieren las primeras derivadas, las segundas y hasta en ocasiones un importante sustrato de las de tercer orden en las variables del modelo. Frecuentemente, estas derivadas son muy tediosas de obtener y pueden ser fuentes de error importantes, aun cuando la hoja de cálculo permite obtener evaluaciones numéricas fácilmente.

Desde el punto de vista de la formación de los estudiantes sobre las cuestiones metrológicas, no es del todo relevante que se gaste mucho tiempo en el cálculo de derivadas analíticas pero si es interesante que puedan manipular modelos razonablemente complejos como el que se considera aquí, es por eso que a continuación se presentan herramientas alternas que resuelven esa disyuntiva.

3 Los cálculos con wxMaxima©

"WxMaxima©" es una interfaz gráfica multi-plataforma para Maxima© [2], que es un sistema de álgebra asistido por computadora desarrollado inicialmente en el MIT (Massachusetts Institute of Technology) y distribuido libremente bajo la licencia "GPL" (General Public Licence). El tipo de licencia y la capacidad de procesamiento simbólico de las matemáticas en varias áreas del conocimiento, hacen de esta herramienta una poderosa ayuda para los estudiantes, y que está disponible sin costo alguno y altamente eficiente. El modo de funcionamiento de la interfaz "wxMaxima" es tan intuitivo que los estudiantes adoptan esta herramienta con un gusto no disfrazado en poco menos de dos horas durante una práctica introductoria. Una breve introducción manipulando integrales, derivadas y un mínimo de álgebra lineal básica (es decir, construir matrices y vectores y multiplicarlos) es suficiente para nuestro propósito.

La ventaja de "wxMaxima" es que el programa se encarga de generar las derivadas necesarias automáticamente y proporciona un medio para obtener de ellas los valores numéricos necesarios a la propagación de la incertidumbre de manera inmediata.

Los cálculos con Wxmaxima implican desarrollar un guión cuya estructura sigue de manera natural el planteamiento del problema considerado. El análisis se va concretar en una secuencia racional de pasos a seguir, pasando por alto (pero teniendo conciencia de los aspectos y dificultades algebraicas), los tediosos desarrollos analíticos. El estudiante aprende aquí a estructurar el problema sin perderse en los detalles analíticos y enfocándose en la búsqueda de resultados numéricos precisos y correctos. Esa herramienta ayuda a concretar en el mundo real las matemáticas en torno a un problema dado, llevando a un plano meramente técnico, lo que usualmente sólo distrae la atención del objetivo principal y que es el álgebra diferencial. Esta no es central en la comprensión y evaluación del problema de propagación de incertidumbre. Es un mal necesario y "wxMaxima" es parte de la cura.

Aquí se describe la estructura del guión generado para resolver el problema de la propagación de la incertidumbre en el cálculo de la densidad del aire. Un guión completo para tal efecto está disponible y podrá solicitarse a los autores. Utilizaremos el símbolo → para señalar comandos que se teclean directamente desde la interfaz de usuario, la cual se muestra en la copia de pantalla de la figura 1.

3.1 Introducción

Al inicio se cargan en la memoria módulos de cálculo necesarios (en este caso, él de álgebra lineal) y se definen funciones prácticas para el problema :

→ **load(linearalgebra);**

Necesitaremos la transpuesta de matrices, la traza de una matriz y el producto tensorial (de Kronecker) disponibles en este modulo:

→ **trp(x) := transpose(x);** y
→ **kp(x,y) := kronecker_product(x,y);**
→ **traza(x) := mat_trace(x);**

donde "x,y" son tablas o listas de dimensiones, en principio, arbitrarias.

3.2 Modelo formal

En esta parte se plantea el modelo [8], definiendo las funciones necesarias, en especial la fugacidad *fug(T,p)*, la presión de saturación $p_s(T)$, la compresibilidad *z(T,hr,p)*, $x_v(T,hr,p)$ definida por $hr*fug(T,p)*p_s(T)/p$; etcétera, hasta llegar a la densidad del aire "*da(-)*":

→ **(%i8) da(T,hr,p,ec):=p*Ma/(z(T,hr,p)*R*T)*(1-xv(T,hr,p)*(1-Mv/Ma))+ec;**

que es el modelo simbólico de la densidad del aire, con las variables especificadas y donde "T" es la temperatura "p", la presión y "hr" la humedad relativa. El listado de las variables del modelo se puede obtener directamente de:

→ **lov:listofvars(%);**

Alternativamente, como no se distinguen los parámetros constantes de las variables al ejecutar esta instrucción, es preferible modificar la lista de variables del modelo, dejando en este caso “Ma” y “Mv” constantes, y definiendo una lista “lov2”:

→ **lov2:[T,hr,p,R,ec];**

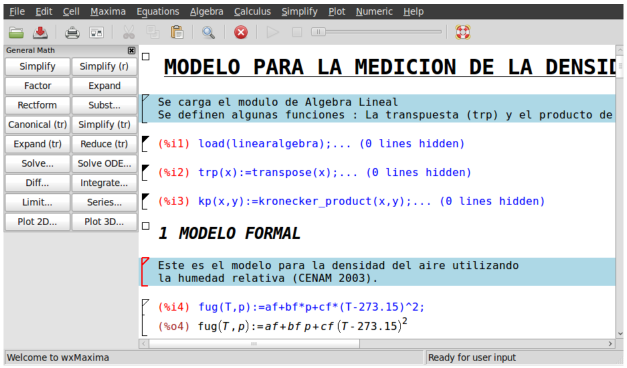

Figura 1: Captura de pantalla mostrando wxMaxima ejecutando el ejercicio descrito.

3.3 Álgebra lineal

Teniendo el modelo simbólico de “**da(-)**”, hace falta calcular los diversos tipos de derivadas parciales que se requieren para la fórmula de propagación de la incertidumbre. En términos de álgebra lineal se requieren el gradiente, la hesiana y a su vez un sustrato de términos del tensor de las terceras derivadas del modelo “**da(-)**” respecto a todas las variables de la lista “**lov2**”. El gradiente “**GR**” se puede obtener de las dos siguientes instrucciones:

→ **for i : 1 thru 5 do**
for j : 1 thru 1 do
gr[i,j]:= diff(da(T,hr,p,ec),lov2[i],1);

→ **GR: genmatrix(gr,5,1);**

o bien de la transpuesta de la jacobiana del campo escalar “da(-)” mediante:

→ **GR: trp(jacobian(da(T,hr,p,ec),lov2));**

lo cual es un poco más corto y elegante. La matriz “hesiana” del campo “da(-)” se puede obtener sencillamente de:

→ **HESS: hessian(da(T,hr,p,ec),lov2)$;**

La diagonal del tensor de las terceras derivadas de "da(-)", necesaria para la evaluación de la influencia en la incertidumbre de términos correctivos de orden mayor que 1 en la incertidumbre combinada para variables no co-relacionadas propuesta por la “GUM” se calcula mediante:

→ **for i : 1 thru 5 do**
for j : 1 thru 5 do
B[i,j]:=diff(da(T,hr,p,ec),lov2[i],1,lov2[j],2);

→ **BB:genmatrix(B,5,5);**

obteniéndose una matriz de dimensión (5,5) que contiene las expresiones analíticas de las derivadas. La instrucción:

diff(da(T,hr,p,ec),lov2[i],1,lov2[j],2)

corresponde a:

$$\frac{\partial^3 \rho_a}{\partial x_i \partial^2 x_j^2}$$

para cualquier variable “x_i” o “x_j” dentro de la lista predefinida de variables “lov2”. Aquí es importante subrayar que las últimas instrucciones producen las derivadas parciales simbólicas que tanto trabajo generan en la práctica, y usualmente consumen un tiempo importante. En este caso, “wxMaxima” no despliega la matriz hesiana “HESS” ni la matriz “BB” sencillamente porque son expresiones demasiado largas. Realmente no tiene sentido encontrar esas derivadas en una sola expresión analítica. Será más importante ver que esas matrices se pueden evaluar numéricamente al momento de efectuar las aplicaciones numéricas.

Siguiendo con la construcción de matrices, se plantea un Vector de Incertidumbres en las variables “VU”:

→ **VU: matrix([uT],[uhr],[up],[uR],[uec]);**

y una matriz de varianza - covarianza formal “MVCV”:

→ **MVCV: matrix**
([uT^2,uThr ,uTp ,uTR ,uTec],
[uThr ,uhr^2 ,uhrp,uhrR ,uhrec],
[uTp ,uhrp ,up^2,upR ,upec],
[uTR ,uhrR ,upR ,uR^2,uRec],
[uTec,uhrec ,upec ,uRec,uec^2]);

donde “u” se refiere a “incertidumbre combinada”, seguido por una combinación de letras refiriéndose a las diversas combinaciones de covarianzas. Si se quiere tener acceso a las correcciones de orden mayor a 1, se han desarrollado fórmulas que ocupan las matrices anteriores y que serán publicadas en otra parte. Existe otra alternativa que consiste en generar dos jacobianas adicionales según Mana y Pennechi [11]:

→**JXXX:jacobian([traza((hessian(da(T,hr,p,ec),**
lov2)).(MVCV))],lov2)$

→**JXXX0:jacobian([traza((hessian(da(T,hr,p,ec),**
lov2)).(MV))],lov2)$

donde “**MV**” es una matriz diagonal principal formada con el cuadrado de los elementos de “**VU**”.

3.4 Aplicación numérica

3.4.1 Constantes y parámetros

En esta etapa las constantes que aparecen en las diversas partes del modelo se especifican. Por ejemplo, la fugacidad contiene 3 parámetros “**af**”, “**bf**” y “**cf**” que se especifican de la siguiente manera:

→ **af:1.00062; bf:3.14e-8; cf:5.60e-7;**

utilizando en este caso los valores numéricos reportados en [8]. Los valores de las variables se especifican de la misma manera:
→ **hr:0.5; T:294.15; p:80628.0;**

3.4.2 Valores de las funciones

En esta etapa se obtienen inmediatamente los diversos valores de las funciones disponibles para el cálculo de la densidad y de su incertidumbre. Cabe señalar que los valores que se obtienen aquí sólo cambiarán si los antecedentes cambian y si se procesa nuevamente la función. Con los valores especificados para las variables y los parámetros:
→ **fug(T,p);** devuelve: **1.0033986792...** en las unidades apropiadas, en este caso; sin unidad,
→ **ps(T);** devuelve 2488.059238... (Pa),
→ **xv(T,hr,p);** devuelve 0.015481689... (-),
→ **z(T,hr,p);** devuelve 0.999691115... (-),
y finalmente la densidad del aire:
→ **da(T,hr,p,ec);** devuelve ec+0.9495475... (kg m^{-3}) a las condiciones consideradas ("ec" es el error debido a la calibración del modelo). Este valor se puede comparar con lo reportado en la literatura [8].

3.5 Propagación de la incertidumbre
3.5.1 Sin correlación

A partir de este punto es posible evaluar, mediante una muy intuitiva instrucción "ev", el gradiente del campo escalar "**da(-)**" en la matriz "**GR**":
→ ***ev(GR);***
Así mismo, la matriz hesiana de las segundas derivadas parciales "HESS" puede ser evaluada:
→ ***ev(HESS);*** *(ver ilustración 1)*
Es importante notar que esta hesiana es usualmente una matriz tediosa de obtener ya que involucra cálculos analíticos importantes. Aquí, la parte analítica pasa a segundo plano y es factible, y probablemente suficiente dado el propósito, inducir los estudiantes a verificar unos de estos valores por métodos analíticos o numéricos.
Al definir las varianzas en cada variable se puede evaluar la matriz de varianza – covarianza "**MV**":
→ **up:14.2; uT:0.061; uhr:0.011; uR:84e-7;**
uec:1e-4*0.9495475;
→ **ev(MV);**
La evaluación de la incertidumbre combinada sin correlación en las variables se obtiene de lo anterior mediante una simple instrucción basada en la traducción de la fórmula de la "GUM" en términos de álgebra lineal:
→ **ev(sqrt(trp(GR).MV.GR));**
dando el resultado esperado de **$3.1595*10^{-4}$** kg.m^{-3} que se puede comparar con el valor de 0.00032 kg.m^{-3} reportado por el CENAM [8].

3.5.2 Con correlación

Para evaluar el efecto de las correlaciones en las variables, se definen los coeficientes de correlación entre pares de variables de Pearson para construir la matriz completa de varianza – covarianza en "**MVCV**":
→ **uThr:-0.538*uT*uhr; uTp:0.134*uT*up;**
uhrp:-0.075*uhr*up; uTR:0;
uTec:0; uhrR:0; uhrec:0;
upR:0; upec:0; uRec:0;
→ **ev(MVCV);**
La incertidumbre combinada con correlación en las variables se obtiene de la misma manera que anteriormente pero utilizando la matriz de varianza - covarianza completa "**MVCV**":
→ **ev(sqrt(transpose(GR).MVCV.GR));**
El resultado obtenido en este caso es $2.53815*10^{-4}$ kg.m^{-3} a comparar con el valor de 0.00026 kg.m^{-3} reportado por el CENAM [8].

3.5.3 Con correcciones de orden mayor y sin correlaciones

Podemos evaluar el vector de incertidumbres en las variables: → **ev(VU);** así como el sustrato del tensor de terceras derivadas → **ev(BB).**
La evaluación de los términos correctivos, según la GUM, correspondientes a contribuciones de orden mayor que dos en las varianzas se obtiene de la siguiente fórmula:
→ **ev(1/2*trp(VVCV2).(kp(HESS,HESS)).(VVCV2)**
+trp(GR*VU^2).BB.(VU^2));
dando el resultado de $3.841339*10^{-13}$ kg.m^{-3}. El mismo resultado se puede obtener mediante la fórmula de Mana y Pennechi [11]:
→ **ev(1/2*traza((HESS.MV)^^2)**
+ trp(GR).(MV).trp(JXXX0));

Este resultado difiere ligeramente de lo reportado en [8], pero la conclusión es la misma: los términos adicionales sugeridos por la GUM para este tipo de problemas no representan una contribución significativa en este caso.
Para la cuestión educativa, es importante hacer notar que este resultado sólo se podría obtener después de una enorme cantidad de cálculos analíticos o numéricos, llevando a la conclusión que estos no fueron necesarios. Por lo menos el interés del presente acercamiento radica en evitar esa frustración. Con tan sólo haber construido y evaluado la matriz "**BB**" por ejemplo, se tiene acceso a la conclusión con dos instrucciones simples, y a la posibilidad de evaluar básicamente cualquier término del conjunto de correcciones adicionales en la fórmula de la GUM.

El guión construido es reutilizable para efectuar cálculos simbólicos y numéricos a otras condiciones, por ejemplo de temperatura, presión o humedad relativa. Los estudiantes apreciarán la posibilidad de modificar este guión para otros modelos, preservando la estructura o bien la posibilidad de asignar otros valores para las incertidumbres en las variables del modelo.

El programa wxMaxima no es el único que permite producir los resultados presentados. Sin embargo, insistimos sobre el hecho de que es una herramienta disponible libremente y sin costo, lo cual es muy atractivo para el equipamiento de uno o más salones. Más allá de este aspecto, el presente ejemplo muestra que es posible validar los resultados obtenidos contra referencias nacionales oficiales, lo que demuestra, ante la complejidad de los cálculos efectuados, la alta calidad y fiabilidad del programa.

4 Cálculos mediante simulación de Monte Carlo

Se cuenta con herramientas que permiten dirigir la atención del estudiante sobre lo esencial de un modelo y de la propagación de la incertidumbre más que sobre el cómo calcular derivadas parciales. También se tienen soluciones que permiten pasar de “derivadas hechas por la máquina” a métodos donde no se requieren derivadas como es el caso de las simulaciones de Monte Carlo. Después de haber conocido y manipulado la complejidad de la propagación de incertidumbres mediante wxMaxima es factible emplear lenguajes interpretados para esta actividad. La ventaja de esos lenguajes es que permiten programar la matemática involucrada en metrología e interpretarla inmediatamente, es decir obtener resultados numéricos de una expresión simbólica sin tener que haber escrito todo un código estructurado como sucede con un lenguaje compilado.

Para el propósito del ejemplo tratado aquí, es interesante implementar con los estudiantes las simulaciones de Monte Carlo para el modelo considerado, con el objetivo no solamente de validar los cálculos hechos con las herramientas analíticas sino también el estimar las distribuciones de las densidades calculadas así como estimar sus intervalos de confianza para una probabilidad predefinida.

El conocido MATLAB® es uno de esos lenguajes interpretados que se presta particularmente bien a la presente actividad. Una versión libre muy práctica y poderosa para educación es “Octave” [1] el cual puede ser utilizado convenientemente a través de una amena interfaz de programación, también libre, llamada “QtOctave” [12], y mostrada en la figura 2.

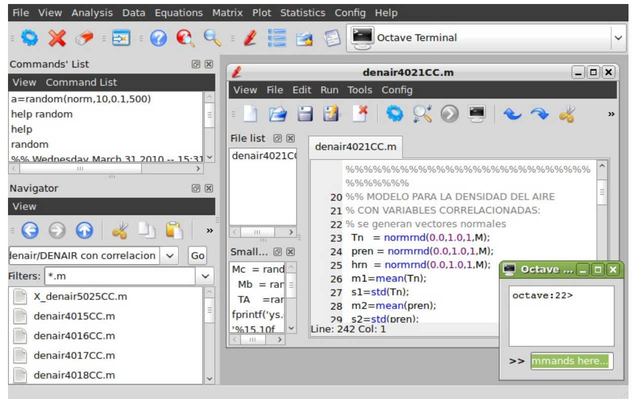

Figura 2: Interfaz QtOctave para Octave.

El método de “Monte Carlo” adaptativo es utilizado aquí a través de “Octave” a partir de las indicaciones del suplemento 1 de la “GUM” [4] y de una codificación recientemente publicada para MATLAB® [5]. Cabe mencionar que el código publicado en la referencia [5] se puede usar inmediatamente, sin modificación, en “Octave”. El código que se presenta a continuación completa el código de [5] en el sentido que permite llevar a cabo simulaciones sobre variables correlacionadas entre ellas.

Las simulaciones de Monte Carlo, para nuestro propósito se basan en la propagación de las distribuciones de las incertidumbres en las variables a través del modelo de la densidad del aire más que sobre la propagación de las incertidumbres mismas. Por lo tanto es necesario tener acceso a las distribuciones mencionadas y para eso a generadores de números aleatorios que se puedan parametrizar. Matlab u Octave contienen varios de ellos como por ejemplo el que se invoca después de la instrucción “***normrand()***” que genera series de números seudo aleatorios con una distribución normal de promedio, varianza y número de datos definidos por el usuario. Para generar simulaciones de distribuciones de variables correlacionadas, es necesario involucrar técnicas matemáticas específicas para eso. En el ejemplo que sigue se aplica una secuencia que consiste en: 1) generar distribuciones normalizadas para cada variable del modelo, 2) definir una matriz de varianza – covarianza para el conjunto de variables, en este caso, basada en coeficientes de correlación de Pearson entre cada par de variables, 3) efectuar la descomposición de Cholesky de la matriz (su existencia es una condición necesaria y suficiente para continuar), 4) generar variables en distribuciones correlacionadas con varianzas y coeficientes de correlación predefinidos mediante la transformación de Cholesky [13], 5) re-centrar esas distribuciones en promedios definidos.

```
----------- Inicia código de Octave --------------------
% Se generan vectores normales de las variables
  Tn    = normrnd(0.0,1.0,1,M);
  pren = normrnd(0.0,1.0,1,M);
  hrn   = normrnd(0.0,1.0,1,M);
  m1 = mean(Tn)    ;  s1 = std(Tn);
  m2 = mean(pren) ;  s2 = std(pren);
  m3 = mean(hrn)   ;  s3 = std(hrn);
% Normalizar las 3 distribuciones
  T1 = (Tn  - m1)/s1;
  pre1 = (pren - m2)/s2;
  hr1  = (hrn - m3)/s3;
% Fabricar una matriz de varianza – covarianza
% con coeficientes de Pearson
% y varianzas definidas:
% 1) temperatura del aire 21ºC
  unT=sqrt(0.005^2+0.003^2+0.061^2);
% 2) Presión atmosférica
  unp = sqrt(5.0^2+2.9^2+13.0^2);
% 3) Humedad relativa del aire
  unh=sqrt(0.01^2+0.0029^2+0.0016^2);
% COVARIANZAS
  uThr = -0.538*unT*unh;
  uTp  =  0.134*unT*unp;
  uhrp = -0.075*unh*unp;
  VCV=[unT*unT , uTp       , uThr;
           uTp        , unp*unp , uhrp;
           uThr       , uhrp       , unh*unh];
% Los promedios deseados:
  muT= 294.15;  mup= 78500.0;  mhr=0.40;
  mu=[muT;mup;mhr];
%Descomposicion de Cholesky de VCV
%La existencia de esa matriz LVCV, señala que
%VCV es efectivamente una matriz de varianza -
%covarianza (- semi - definida positiva)
  LVCV=chol(VCV);
%LVCV es la parte diag. Sup. de la
%descomposición, se requiere la parte diag. Inf.
  TLVCV=LVCV';
  VVARI=[T1;pre1;hr1];
%Construir el vector de variables correlacionadas
  XVARI=TLVCV*VVARI;
%Identificar las variables generadas
  T   =XVARI(1,:)+mu(1);
  pre=XVARI(2,:)+mu(2);
  hr  =XVARI(3,:)+mu(3);
----------- Finaliza código de Octave --------------------
```

A partir de allí se tienen definidos vectores de números aleatorios para cada variable del modelo, con distribuciones normales alrededor de un promedio definido, con ciertas correlaciones entre ellas y una varianza definida. Al graficar la matriz de varianza – covarianza de las variables se obtiene la figura 3, que muestra una clara correlación entre T y hr (coeficiente negativo), una ligera correlación positiva entre T y p y una, tal vez, menos clara correlación (negativa) entre p y hr.

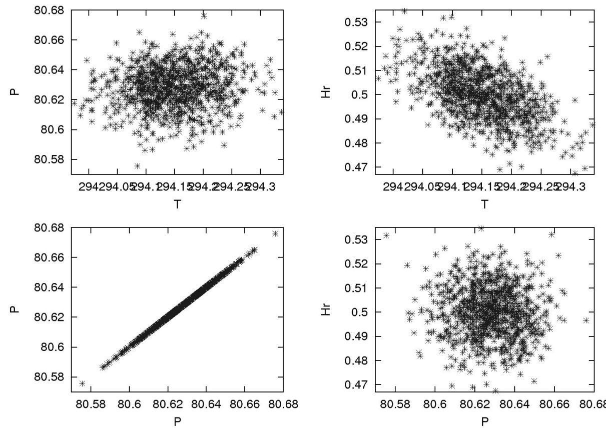

Figura 3: Correlación entre las tres variables T, p y hr. En pares (sólo se muestra la correlación (p,p) para señalar la diagonal de la matriz).

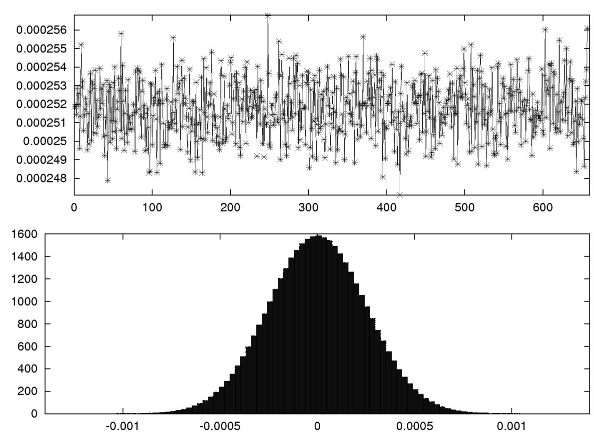

Figura 4: Resultados de una simulación de Monte Carlo para la determinación de la densidad del aire a 80628 Pa y 294.15 K. Arriba: estabilización de la incertidumbre expandida. Abajo: distribución alrededor del primer momento (dispersión).

Los resultados que arrojan las simulaciones de Monte Carlo consisten en la obtención de histogramas e informaciones sobre la estabilización de los cálculos y por ende de sus precisiones, como se muestra en la figura 4. Los datos correspondientes tienen como valores T = 298.15 K, hr = 50 % y p = 78500 Pa. El promedio de densidad es de: 0.910403 $kg.m^{-3}$ y la varianza es de 0.000252 $kg.m^{-3}$. Esos valores son truncados a 6 cifras después del punto. Los límites inferiores y superiores del intervalo de confianza a 95% son: 0.909908 y 0.910895 kg.m^{-3} respectivamente. La tolerancia numérica es de 0.000001, y suficiente para considerar los resultados validados [5,6]. El tiempo transcurrido durante el cálculo fue de 203.72 s, involucrando 657 réplicas de 10000 datos es decir 6570000 datos en total.

La figura 5, presenta los datos de la simulación en forma de un histograma. Se puede observar, superpuesta, la curva correspondiente a la distribución normal de promedio y varianza igual a lo calculado durante la simulación. No se observa diferencia alguna, la densidad obtenida se encuentra estadísticamente dentro de una distribución normal.

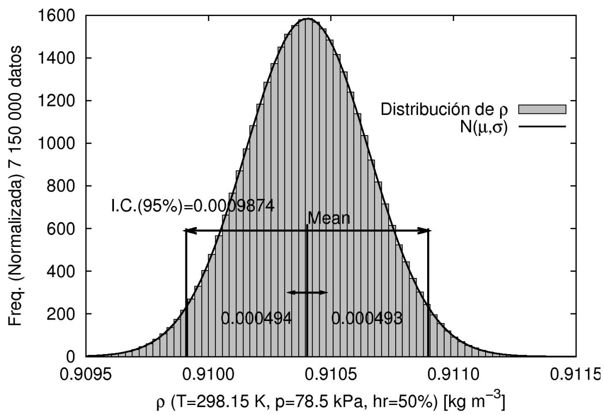

Figura 5: Histograma reprocesado de los datos de la simulación presentada.

5 Resultados y Comparaciones

Los resultados se comparan favorablemente con los datos de incertidumbres combinadas del aire reportadas en [7, 8 y 9] y la herramienta computacional se puede ahora ampliar para extender los resultados a diversas condiciones de temperatura ambiente en intervalos de (16, 28) ºC y presión atmosférica de 78.5 kPa y diferentes condiciones de humedad. En este caso se eligió la presión atmosférica medida en la ciudad de México y humedades relativas de 40, 50 y 60 %. Es posible emplear las herramientas anteriores para llevar a cabo cálculos a cualquier condición. Las incertidumbres en las variables se han mantenido iguales a las reportadas en [8].

Para la cuestión educativa es importante primero pedir a los estudiantes que generen gráficos de la densidad como función de la temperatura y de la humedad relativa como lo muestra la figura 6.

La figura 6 muestra un comportamiento básicamente lineal en el intervalo de temperatura (288-300) K y a tres humedades relativas diferentes. Aún con la complejidad del modelo que calcula la densidad, la no linealidad no es suficiente para que tenga un impacto significativo sobre el valor de la incertidumbre. Tanto Excel como wxMaxima, pueden generar los resultados de la figura 6 y de las incertidumbres respectivas en cada punto de cálculo.

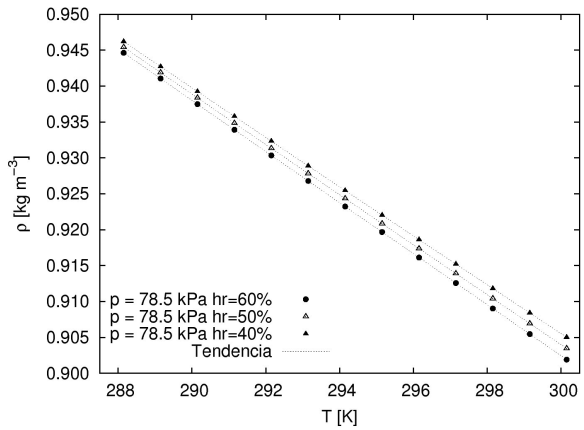

Figura 6: Densidad del aire a 78.5 kPa, función de T y hr

Las figuras 7 y 8 muestran los diferentes valores de la incertidumbre en la densidad del aire (kg/m^{-3}) fijando la presión atmosférica a 78.5 kPa (una aproximación a la presión atmosférica en la ciudad de México) y variando la temperatura de 288 a 300 K y a tres diferentes humedades relativas, 40%, 50%, y 60%, de ahí las tres líneas en las figuras referidas como “hoja de cálculo (analítico)”.

La figura 7, muestra los resultados obtenidos en función de la temperatura de las incertidumbres en “**da(-)**” sin tomar en cuenta alguna correlación entre las variables del modelo.

La figura 8, a diferencia de la 7, muestra la incertidumbre de la densidad del aire (kg/m^{-3}) tomando en cuenta la correlación que existe entre las variables de presión atmosférica y temperatura, presión atmosférica y humedad relativa y temperatura y humedad relativa. En estos cálculos se usaron los valores de correlación reportados en [8]. Como se menciona en dicho artículo, existe una disminución en la incertidumbre del aire debida a la correlación de las variables arriba mencionadas. Nótese que la ventaja de mostrar las incertidumbres de esta forma es la visualización de un mínimo de incertidumbre a 295 K.

En la figura 8, al contrario, la correlación de las variables está tomada en cuenta.

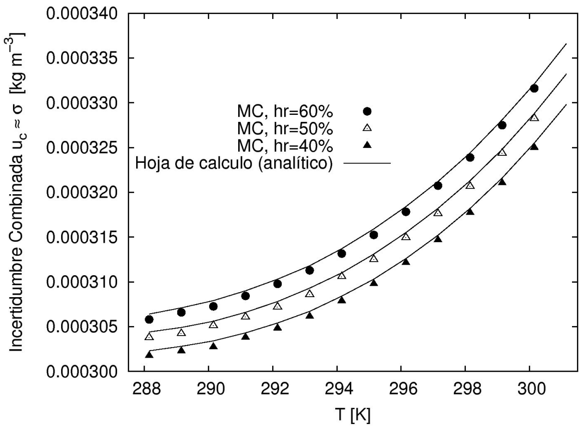

Figura 7: Incertidumbre en da(-), sin correlación en las variables.

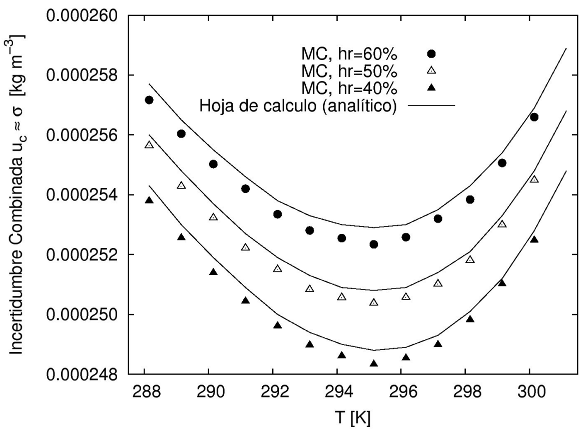

Figura 8: Incertidumbre en da(-) con variables correlacionadas.

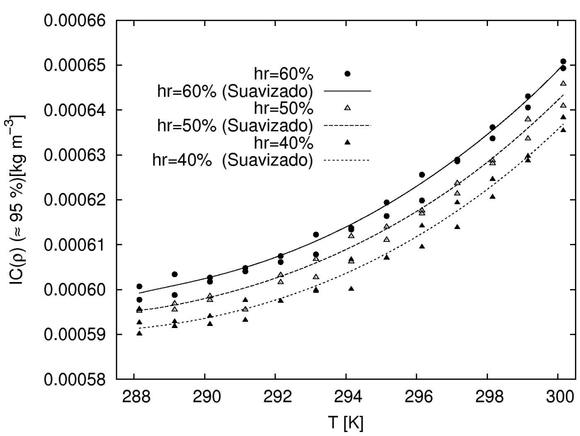

Figura 9: Intervalo de confianza a 95% en el cálculo de la densidad del aire. Caso de variables no correlacionadas.

En ambas figuras, se muestran los resultados obtenidos mediante cálculos con Excel o con wxMaxima, utilizando la fórmula de propagación de la "GUM", cálculos representados mediante lineas continuas, y los resultados obtenidos mediante las simulaciones de Monte Carlo, a diversas condiciones. Los cálculos de simulación no presentan aproximaciones algunas y se llevaron a cabo para asegurar una tolerancia numérica de hasta 1 parte por millón.

Esto permite considerar los resultados de las simulaciones de Monte Carlo como exactos. En general, las simulaciones se estabilizaron en un tiempo del orden de 7 minutos (420 s), manipulando vectores de tamaño del orden de 11.6×10^{6} de datos para 4 variables más el valor promedio de la densidad y su incertidumbre expandida.

Los tiempos de cálculos para el caso de las variables correlacionadas fueron un poco menores, del orden de 2'40'' (165 s), ocupando del orden de 7500000 datos. Todos los cálculos de simulación de Monte Carlo fueron obtenidos con la misma máquina equipada de un procesador AMD-64/X2 y de 4 GB de memoria RAM.

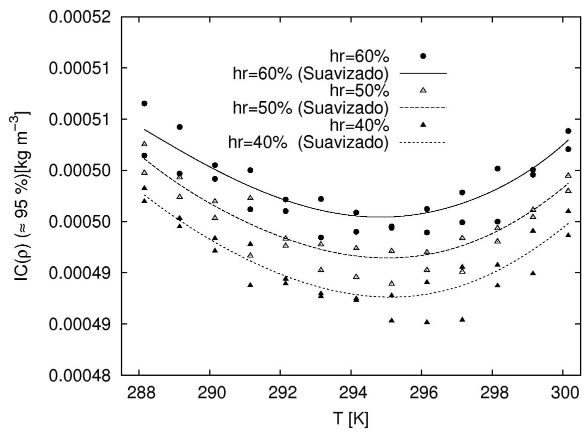

Figura 10: Intervalo de confianza a 95% en el cálculo de la densidad del aire. Caso de variables correlacionadas.

El intervalo de confianza a 95% fue determinado en cada punto a las condiciones que aparecen reportadas en las figuras 9 y 10 para ambos casos de variables sin ó con correlación. Es notable que las tendencias de los intervalos de confianza calculados por el método de Monte Carlo tienen una forma muy parecida a las incertidumbres en función de "T" y de "hr". Sin correlación entre las variables, la incertidumbre en "da(-)" crece ligeramente, pero de manera monotónica en función de "T" y "hr", así como en el caso del intervalo de confianza. Si las variables son correlacionadas, tanto la incertidumbre en "da(-)" como el intervalo de confianza muestran un inesperado comportamiento que presenta un mínimo en función de “T” a cada “hr”. Este mínimo aparece en consecuencia de las correcciones que aportan los coeficientes de sensibilidad al frente de las covarianzas en las variables en la fórmula de propagación, y en especial del hecho que algunas de esas contribuciones pueden ser negativas. Esto explica que las incertidumbres calculadas con variables correlacionadas suelen ser, como es el caso aquí, menores que cuando son calculadas con variables no correlacionadas. También, el cambio en el comportamiento en función de una de las variables se puede explicar de la misma manera.

Finalmente, es también notable la excelente concordancia entre los resultados obtenidos mediante simulación y mediante las fórmulas de la “GUM”. Los resultados de simulaciones proporcionan valores de la incertidumbre sistemáticamente menores que los resultados analíticos de la “GUM” en magnitudes del orden de 10^{-7} kg.m^{-3}. Esto es posiblemente debido a que la simulación incluye todas las correcciones que no están tomadas en cuenta en la fórmula de propagación estándar.

6 Conclusión

Basándose en un ejemplo concreto de la determinación de la incertidumbre en la densidad del aire a condiciones atmosféricas mostramos una secuencia de actividades que permiten llevar el estudiante de un curso sobre metrología hacia una gran profundidad en la manipulación de conceptos y la práctica del quehacer matemático en la cuestión de la propagación de incertidumbres. Los tópicos involucrados van desde el tradicional acercamiento con una “hoja de cálculo” hasta la implementación del método de simulación de Monte Carlo pasando por el procesamiento simbólico. Dos herramientas computacionales libres han sido empleadas, Octave para el método de Monte Carlo y wxMaxima para implementar la fórmula de propagación de la “GUM” de manera analítica.

Usando esta herramienta, es posible generar rápidamente resultados de alta calidad, sea mediante simulaciones o mediante cálculos analíticos automatizados. El estudiante, al final del ejercicio tiene un programa y un conjunto de herramientas que le ayuda a calcular la densidad del aire a diferentes condiciones de temperatura, presión atmosférica y humedad así como la incertidumbre en esta variable y el intervalo de confianza, además de haber aprendido diversas herramientas computacionales que le serán de utilidad en otras áreas de su carrera.

Referencias

[1] GNU Octave, version 3.0.5 Copyright (C) 2008 www.gnu.org/software/octave/ (07/2010) o John W. Eaton, "GNU Octave Manual", Network Theory Limited, 2002. www.octave.org/ (05/2010)
[2] Maxima, a Computer Algebra System. Version 5.18.1 (2009). maxima.sourceforge.net/ (05/2010).
[3] Davis R. S. Equation for the Determination of the Density of Moist Air (1981/1991). Metrologia 1992, 29, 67-70.
[4] JCGM 100:2008 Evaluation of measurement data — Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM 1995 with minor corrections) First edition September 2008.
[5] JCGM 101:2008 Evaluation of measurement data - Supplement 1 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” - Propagation of distributions using a Monte Carlo method.
[6] M. Solaguren-Beascoa Fernández, J. M. Alegre Calderón y P. M. Bravo Díez, Implementation in MATLAB of the adaptive Monte Carlo method for the evaluation of measurement uncertainties, Accred. Qual. Assur. (2009) 14: 95–106.
[7] Trujillo Juárez S. y Arias Romero R., Incertidumbre en la calibración de un matraz volumétrico. Centro Nacional de Metrología, México, diciembre 2002. www.cenam.mx
[8] Becerra Santiago L. O. y Guardado González M. E., Estimación de la Incertidumbre en la Determinación de la Densidad del Aire. Centro Nacional de Metrologia, México 2001. www.cenam.mx
[9] L. O. Becerra and I. Hernández, Evaluation of the air density uncertainty: the effect of the correlation of input quantities and higher order terms in the Taylor series expansion. Meas. Sci. Technol., 17, (2006), 2545–2550.
[10] J.C. Sanchez Ochoa, A. Zúñiga Moreno y C. Bouchot, Propuesta para la Enseñanza de la Metrología en la Carrera de Ingeniería Química de la ESIQIE, Memorias del XXX Encuentro Nacional de la AMIDIQ, 19-22 de Mayo de 2009, Mazatlán, Sin. México.
[11] Mana G. y F. Pennechi. Uncertainty propagation in non-linear measurement equations. Metrologia 44 (2007) 246–251.
[12] QtOctave v0.8.1, http://qtoctave.wordpress.com (07/2010)
[13] S. C. Chapra. Applied Numerical Methods with MATLAB, for Engineers and Scientists. McGraw Hill, Second Edition, 2008.