Metrología y Estadística (Bayesiana)

Eduardo Gutiérrez Peña

Departamento de Probabilidad y Estadística
Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas
Universidad Nacional Autónoma de México

Metrología y Estadística (Bayesiana)

Eduardo Gutiérrez Peña

Departamento de Probabilidad y Estadística
Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas
Universidad Nacional Autónoma de México

(Ex-ITAM)

Metrología y Estadística (Bayesiana)

Eduardo Gutiérrez Peña

Departamento de Probabilidad y Estadística
Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas
Universidad Nacional Autónoma de México

(Ex-ITAM)

En colaboración con Jesús Sánchez (ESIQIE, IPN) y Raúl Rueda (IIMAS, UNAM)

¿De qué vamos a hablar hoy?

1. Metrología
   - Medición, unidades, incertidumbre, calibración, trazabilidad
   - Guía para la Expresión de la Incertidumbre en la Medición (GUM)
2. Propagación de incertidumbre
   - El caso gaussiano/lineal
   - El caso general
3. Estadística
   - Inferencia
   - Una descripción alternativa de la incertidumbre

¿Qué es la Metrología?

"La rama de la ciencia que se refiere a la medición."

Medición

- Impacta todos los aspectos de nuestra vida, por lo que es importante garantizar la calidad de las mediciones.
- La exactitud y precisión requeridas deben ser acordes con el propósito de la medición.

Unidades

- El Sistema Internacional de Unidades es el sistema estándar, adoptado por los científicos de todo el mundo.
- Existen 7 unidades básicas: kilogramo, metro, segundo, amperio, kelvin, candela y mol.
- De estas unidades se derivan otras que se utilizan para medir, por ejemplo, área, volumen, velocidad, densidad, etc.

La evaluación de la incertidumbre en las mediciones es un problema muy importante en metrología. El resultado de cualquier medición debe ir acompañado de una descripción de la incertidumbre asociada

Calibración

- Comparación de un instrumento con un estándar con el propósito de encontrar errores en sus mediciones
- El resultado de la calibración es un certificado que reporta los errores del instrumento (o las correcciones que se deben aplicar) así como la incertidumbre correspondiente

Trazabilidad

- Es posible establecer una cadena de calibraciones que nos lleve hasta el estándar de un organismo nacional o internacional
- Esta relación (que se puede rastrear claramente) entre la medición y el estándar (cuya exactitud es conocida) se conoce como trazabilidad
- Las mediciones sólo se pueden rastrear si se aplican la correcciones de las calibraciones y se toman en cuenta las incertidumbres correspondientes

Guía para la Expresión de la Incertidumbre en la Medición (GUM)

- Es un documento elaborado originalmente por la Organización Internacional para la Normalización (ISO) en 1993
- Actualmente lo mantiene un grupo de 7 instituciones internacionales que incluye al Buró Internacional de Pesos y Medidas (BIPM)
- Establecereglas generales para evaluar y expresar la incertidumbre en la medición

La GUM tiene varias limitaciones, por lo que en 1997 se creó el Grupo de Trabajo No. 1 del Comité Conjunto para Guías en Metrología (JCGM-WG1), que se encarga de "promover el uso de la GUM y preparar los suplementos para su amplia aplicación"

Las dos limitaciones principales de la GUM son las siguientes:

- Falta de generalidad en los métodos propuestos para obtener un 'intervalo de cobertura' con la probabilidad estipulada (e.g. 95 %)
- Las recomendaciones de la GUM no cubren el caso multivariado de manera adecuada

Suplementos

Debido a estas limitaciones, en 2008 el JCGM decidió revisar la GUM.

El lugar de modificar la GUM completamente, el JCGM elaboró dos documentos suplementarios:

- Suplemento 1 (GUM-S1). “Propagación de distribuciones mediante el uso del Método de Monte Carlo” (2008).
- Suplemento 2 (GUM-S2). “Extensión a cualquier número de variables de salida” (2008).

Durante la elaboración de estos suplementos, el JCGM consideró que la Estadística Bayesiana ofrecía una manera más sencilla e intuitiva de superar las limitaciones y dificultades de la GUM.

Sin embargo, una consecuencia de adoptar la interpretación bayesiana en los suplementos es que la GUM original ya no es congruente con ellos.

¿Hacia una nueva GUM?

Lo anterior motivó la propuesta de revisar y modificar por completo la GUM.

Existe ya un borrador, que se ha circulado entre los principales institutos y centros nacionales de metrología del mundo con el fin de obtener retroalimentación.

Este documento hace uso de la interpretación y procedimientos bayesianos para expresar y evaluar la incertidumbre en la medición.

Es justo decir que los cambios propuestos no han sido bien recibidos por la comunidad metrológica tradicional.

Entidades interesadas en los cambios a la GUM en México

- Centro Nacional de Metrología (CENAM)
- Entidad Mexicana de Acreditación (EMA)
- Laboratorios secundarios
- Industria
- Universidades

"Incertidumbre es la situación que involucra información imperfecta o desconocida. Es un término que se usa de maneras sutilmente distintas en una variedad de campos tales como filosofía, física, estadística, economía, sicología, ingeniería, metrología y ciencias de la información.

Aplica a la predicción de eventos futuros, a mediciones físicas ya realizadas o a lo desconocido. La incertidumbre surge en ambientes estocásticos y/o parcialmente observables, así como debido a la ignorancia."

– Traducido de Wikipedia –

"La probabilidad es el lenguaje de la incertidumbre"

– Pierre-Simon Laplace –

Propagación de incertidumbre

Tenemos $X \sim f_X(x)$ y un sistema (función) g

$$X \quad \longrightarrow \quad g(\cdot) \quad \longrightarrow \quad Y$$

Deseamos encontrar $f_Y(y)$ y así describir la incertidumbre sobre el valor de Y

En general

$$f_X(x) = f_X(x|\theta)$$

y

$$g(x) = g(x;\beta)$$

donde θ y/o β pueden ser *desconocidos*

(Por ahora supondremos que son conocidos)

Caso gaussiano/lineal

$$f_X(x|\theta) = N(x|\mu,\sigma^2); \qquad \theta = (\mu,\sigma^2)$$

$$g(x;\beta) = \beta_0 + \beta_1 x \qquad \beta = (\beta_0,\beta_1)$$

Tenemos

$$E(X) = \mu \quad \text{y} \quad \text{Var}(X) = \sigma^2$$

Deseamos

$$E(Y) \quad \text{y} \quad \text{Var}(Y)$$

Entonces

$$f_Y(y) = N(y|\beta_0 + \beta_1\mu, \beta_1^2\sigma^2)$$

Notemos que, en este caso,

$$E(Y) = g\left(E(X)\right) \quad \text{y} \quad \text{Var}(Y) = g'\left(E(X)\right)^2 \text{Var}(X)$$

Caso gaussiano/lineal

$$f_X(x|\theta) = N(x|\mu, \sigma^2); \qquad \theta = (\mu, \sigma^2)$$

$$g(x; \beta) = \beta_0 + \beta_1 x \qquad \beta = (\beta_0, \beta_1)$$

Tenemos

$$E(X) = \mu \qquad \text{y} \qquad \text{Var}(X) = \sigma^2$$

Deseamos

$$E(Y) = \beta_0 + \beta_1 E(X) \qquad \text{y} \qquad \text{Var}(Y) = \beta_1^2 \, \text{Var}(X)$$

Entonces

$$f_Y(y) = N(y|\beta_0 + \beta_1 \mu, \beta_1^2 \sigma^2)$$

Notemos que, en este caso,

$$E(Y) = g\left(E(X)\right) \qquad \text{y} \qquad \text{Var}(Y) = g'(E(X))^2 \, \text{Var}(X)$$

Caso general: el "método delta"

El método delta proporciona una aproximación a los valores de $E(Y)$ y $\mathrm{Var}(Y)$, que se basa en una expansión en Serie de Taylor de la función $g(x)$ alrededor del valor $x_0 = E(X)$:

$$E(Y) = E(g(X)) \approx g\left(E(X)\right)$$

y

$$\mathrm{Var}(Y) = \mathrm{Var}(g(X)) \approx g'\left(E(X)\right)^2 \mathrm{Var}(X)$$

¿Suena famililar?

Caso general: el "método delta"

El método delta proporciona una aproximación a los valores de $E(Y)$ y Var(Y), que se basa en una expansión en Serie de Taylor de la función $g(x)$ alrededor del valor $x_0 = E(X)$:

$$E(Y) = E(g(X)) \approx g\left(E(X)\right)$$

y

$$\text{Var}(Y) = \text{Var}(g(X)) \approx g'\left(E(X)\right)^2 \,\text{Var}(X)$$

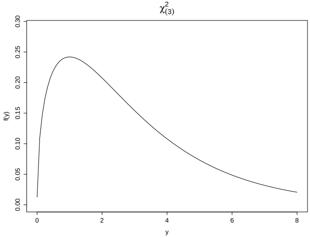
¿Suena famililar?

Ley de Propagación de Incertidumbre (LPI)

$$u^2(Y) = u^2(g(X)) \approx c^2\, u^2(X)$$

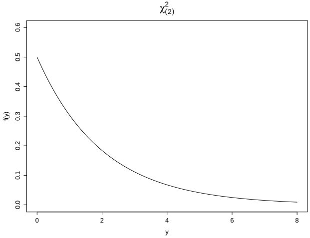
Nota: $u(Y)$ se conoce como la *incertidumbre estándar* de Y y $c = g'(E(X))$ es llamado *coeficiente de sensibilidad*

- El método delta da resultados *exactos* en el caso gaussiano/lineal
- Si X *no* tiene una distribución gaussiana, es posible que $E(X)$ y Var(X) por sí mismos *no* proporcionen una descripción adecuada de $f_X(x)$
- Aún si X tiene una distribución gaussiana, cuando $g(\cdot)$ es una función no lineal entonces Y *no* tiene una distribución gaussiana
- En cualquier caso, es posible que $E(Y)$ y Var(Y) *no* proporcionen una descripción adecuada de $f_Y(y)$



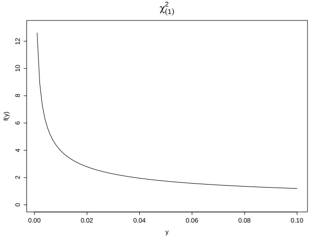
$$Y \sim \chi^2_{(3)} : E(Y) = 3, \text{Var}(Y) = 6$$

- El método delta da resultados *exactos* en el caso gaussiano/lineal
- Si X *no* tiene una distribución gaussiana, es posible que $E(X)$ y Var(X) por sí mismos *no* proporcionen una descripción adecuada de $f_X(x)$
- Aún si X tiene una distribución gaussiana, cuando $g(\cdot)$ es una función no lineal entonces Y *no* tiene una distribución gaussiana
- En cualquier caso, es posible que $E(Y)$ y Var(Y) *no* proporcionen una descripción adecuada de $f_Y(y)$



$$Y \sim \chi^2_{(2)} : E(Y) = 2, \text{Var}(Y) = 4$$

- El método delta da resultados *exactos* en el caso gaussiano/lineal
- Si X *no* tiene una distribución gaussiana, es posible que $E(X)$ y Var(X) por sí mismos *no* proporcionen una descripción adecuada de $f_X(x)$
- Aún si X tiene una distribución gaussiana, cuando $g(\cdot)$ es una función no lineal entonces Y *no* tiene una distribución gaussiana
- En cualquier caso, es posible que $E(Y)$ y Var(Y) *no* proporcionen una descripción adecuada de $f_Y(y)$



$$Y \sim \chi^2_{(1)} : E(Y) = 1, \text{Var}(Y) = 2$$

- En situaciones como ésta, ¿qué tan útiles resultan los valores de $E(Y)$ y $\mathrm{Var}(Y)$?
- Además de lo anterior, hay que tomar en cuenta que, en general, el método delta solamente propociona una *aproximación* a los valores de $E(Y)$ y $\mathrm{Var}(Y)$
- De manera análoga, la LPI solamente propociona una aproximación al valor de $u(Y) = \sqrt{\mathrm{Var}(Y)}$
- Si X no tiene una distribución gaussiana y $g(\cdot)$ es una función no lineal, entonces es posible que el método delta (y, por lo tanto, la LPI) no proporcionen resultados adecuados
- En general, lo apropiado es aplicar la regla de cambio de variable para encontrar la distribución de Y y de esa manera describir la incertidumbre sobre su valor

Ejemplo (Cox & Harris, 2010). $X \sim R(a,b)$ $(0 < a < b)$; $y = g(x) = \ln(x)$

$$f_X(x) = 1/(b-a) \qquad \text{si } a < x < b \quad \text{(cero en otro caso)}$$

$$E(X) = (a+b)/2 \qquad \text{y} \qquad u^2(X) = \mathrm{Var}(X) = (b-a)/\sqrt{12}$$

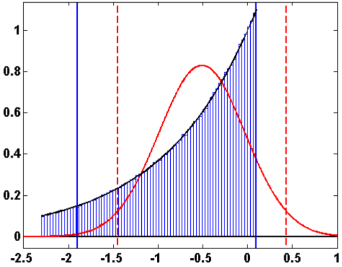
Entonces

$$f_Y(y) = \exp(y)/(b-a) \quad \text{si } \ln(a) < y < \ln(b) \quad \text{(cero en otro caso)}$$

LPI:

$$E(Y) \approx \ln\left((a+b)/2\right) \quad \text{y} \quad u^2(Y) = \mathrm{Var}(Y) \approx c^2(b-a)/\sqrt{12}$$

con $c = 1/E(X) = 2/(a+b)$



$f_Y(y): \; a = 0.1; \; b = 1.1$

¿Y qué hay de la Estadística?

Lo que hemos discutido hasta ahora se refiere a la llamada incertidumbre Tipo B

> *“Una evaluación Tipo B de la incertidumbre estándar usualmente se basa en juicios científicos que usan toda la información relevante disponible.”*

– Fuente: `http://physics.nist.gov/cuu/Uncertainty/typeb.html` –

Podemos decir que este tipo de incertidumbre cae principalmente en el ámbito de la Probabilidad

Por su parte, la incertidumbre Tipo A se relaciona de manera natural con la Estadística y es relevante cuando algunos de los parámetros son desconocidos

> *“Una evaluación Tipo A de la incertidumbre estándar puede basarse en cualquier método estadístico válido para analizar datos. Los elemplos incluyen el cálculo de la desviación estándar de la media de una serie de observaciones independientes...”*

– Fuente: `http://physics.nist.gov/cuu/Uncertainty/typea.html` –

Estadística clásica (frecuentista)

A manera de ilustración, consideremos el caso

$$f_X(x|\mu) = N(x|\mu, \sigma^2) \qquad (\sigma^2 \text{ conocida})$$

Supongamos que μ es *desconocido*, pero que se cuenta con una muestra de observaciones independientes $X_1, X_2, \ldots, X_n$ de $N(x|\mu, \sigma^2)$

Entonces

- μ se estima con $\hat{\mu} = \bar{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$
- Se sabe que $\bar{X} \sim N(x|\mu, \sigma^2/n)$
- La incertidumbre sobre el valor de μ se describe *a través de la incertidumbre sobre el valor de* $\hat{\mu}$; es decir, $u(\hat{\mu}) = u(\bar{X}) = \sigma/\sqrt{n}$

- En este caso existen dos fuentes de incertidumbre

$$
\begin{array}{lll}
X: & u(X|\mu) = \sigma & (\text{Tipo B}) \\
\mu: & u(\mu) \approx u(\hat{\mu}) = \sigma/\sqrt{n} & (\text{Tipo A})
\end{array}
$$

- Sin embargo, lo que interesa en este caso es

$$u(X) = u(X|\mu) + u(\mu) \approx \sigma + \sigma/\sqrt{n} = \sigma\{1 + 1/\sqrt{n}\}$$

- En este caso existen dos fuentes de incertidumbre

$$
\begin{array}{lll}
X: & u(X|\mu) = \sigma & (\text{Tipo B}) \\
\mu: & u(\mu) \approx u(\hat{\mu}) = \sigma/\sqrt{n} & (\text{Tipo A})
\end{array}
$$

- Sin embargo, lo que interesa en este caso es

$$
u(X) = u(X|\mu) + u(\mu) \approx \sigma + \sigma/\sqrt{n} = \sigma\{1 + 1/\sqrt{n}\} \quad (\text{Tipo ?})
$$

- En este caso existen dos fuentes de incertidumbre

$$\begin{array}{lll} X: & u(X|\mu) = \sigma & \text{(Tipo B)} \\ \mu: & u(\mu) \approx u(\hat{\mu}) = \sigma/\sqrt{n} & \text{(Tipo A)} \end{array}$$

- Sin embargo, lo que interesa en este caso es

$$u(X) = u(X|\mu) + u(\mu) \approx \sigma + \sigma/\sqrt{n} = \sigma\{1 + 1/\sqrt{n}\} \quad \text{(Tipo ?)}$$

- Ésta es la incertidumbre que debe propagarse si ahora estamos interesados en $Y = g(X)$
- ¿Qué hacer si, además, σ es desconocida?
- ¿Y si $g(x) = g(x;\beta)$, con β desconocido?

Estadística Bayesiana

El proceso de inferencia bayesiano no hace uso más que de las reglas de la probabilidad

Desde el punto de vista bayesiano, la incertidumbre acerca de μ se describe por medio de una distribución de probabilidad (*a priori*). Por ejemplo

$$f_\mu(\mu) = N(\mu|m, v) \qquad \text{(Tipo B)}$$

La muestra observada se utiliza entonces para *actualizar* el estado de información sobre μ a través de la regla de Bayes

$$f_\mu(\mu|x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{f_\mu(\mu)\, f_X(x_1, x_2, \ldots .x_n|\mu)}{\int f_\mu(\mu)\, f_X(x_1, x_2, \ldots .x_n|\mu)\, d\mu}$$

Esta expresión se conoce como la distribución *a posteriori* de μ

$f_X(x|\mu)$ describe la *variabilidad* de los datos (mediciones) alrededor del parámetro (mesurando).

$f_\mu(\mu)$ describe la *incertidumbre* inicial sobre el valor del parámetro.

La distribución *a posteriori* describe la incertidumbre acerca del valor de μ con base en "toda la información relevante disponible" (¿Incertidumbre Tipo B?)

Al mismo tiempo, se basa en un "método estadístico válido para analizar datos" (¿Incertidumbre Tipo A?)

En el caso gaussiano que nos ocupa, puede demostrarse que dicha distribución es

$$f_\mu(\mu|x_1, x_2, \ldots, x_n) = N(\mu|m_x, v_x)$$

donde

$$m_x = \frac{\frac{n\,\bar{x}}{\sigma^2} + \frac{m}{v}}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{v}} \qquad \text{y} \qquad v_x = \frac{1}{\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{v}}$$

Por otra parte, la distribución *predictiva* de X es

$$f_X(x|x_1, x_2, \ldots, x_n) = \int f_X(x|\mu)\, f_\mu(\mu|x_1, x_2, \ldots, x_n)\, d\mu$$

La cual está dada en este caso por

$$f_X(x|x_1, x_2, \ldots, x_n) = N(x|m_x, \sigma^2 + v_x)$$

Esta distribución describe la incertidumbre acerca del valor de X con base en toda la información disponible y toma en cuenta, de manera natural, la incertidumbre acerca del valor de μ

Notemos que, cuando $v \to \infty$ ó $n \to \infty$, se tiene que

$$m_x \approx \bar{x} \qquad \text{y} \qquad v_x \approx \sigma^2/n$$

En este caso, $u(\mu) \approx \sigma/\sqrt{n}$ y $u(X) \approx \sigma\{1 + 1/\sqrt{n}\}$

- A partir de este punto, las mismas reglas de la probabilidad nos dicen cómo proceder con la propagación de incertidumbre
- Como ya se mencionó, basta con aplicar la regla de cambio de variable
- El mismo tratamiento aplica al caso en el que σ^2 y β son desconocidos
- La incertidumbre sobre sus valores se describe ahora por medio de una distribución *a priori* conjunta $f(\mu, \sigma^2, \beta)$
- Esta distribución se actualiza por medio de la regla de Bayes, obteniendo la distribución *a posteriori* conjunta $f(\mu, \sigma^2, \beta | x_1, x_2, \ldots, x_n)$
- Finalmente, se obtiene la distribución *predictiva* de X y se propaga la incertidumbre por medio de la regla de cambio de variable

Una descripción alternativa de la incertidumbre

Cox & Harris (2010, Cap. 4) discuten las etapas principales de la evaluación de incertidumbre:

1. Formulación (del modelo)
2. Propagación (de la incertidumbre)
3. Resumen (de la información)

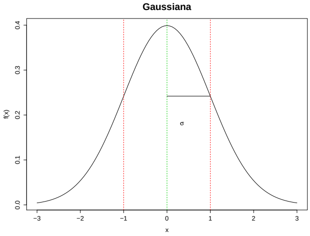
En lo que resta de esta presentación nos vamos a concentrar en el último punto

Ya vimos que $E(X)$ y Var(X) no necesariamente proporcionan un resumen adecuado de $f_X(x)$ si ésta no es gaussiana.

Idea

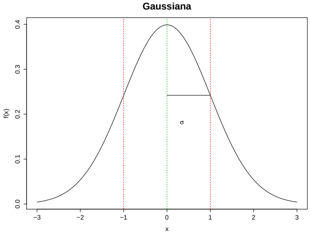
Construir un resumen simple de la distribución $f_X(x)$ a través de tres cuantiles

$$\{x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, x_{\alpha_3}\}$$



El área entre las líneas rojas es aproximadamente 0.68 ($\approx 2/3$)

La “incertidumbre estándar” en este caso es $u(X) = \sigma$



Las tres líneas corresponden, respectivamente, a los cuantiles de orden $\alpha_1 = 0.16$, $\alpha_2 = 0.50$ y $\alpha_3 = 0.84$

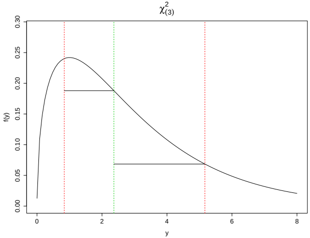
Descripción alternativa de la incertidumbre

$$\tilde{u}(X) = |x_{\alpha_3} - x_{\alpha_2}| = |x_{\alpha_2} - x_{\alpha_1}|$$

Esta especificación es tal que, en el caso gaussiano, $\tilde{u}(X) = \sigma = u(X)$

Distribuciones asimétricas

$Y = g(X)$



Como antes, las tres líneas corresponden, respectivamente, a los cuantiles de orden $\alpha_1 = 0.16$, $\alpha_2 = 0.50$ y $\alpha_3 = 0.84$

En este caso es necesario especificar, simultáneamente, dos "incertidumbres alternativas"

$$\tilde{u}_I(Y) = |y_{\alpha_2} - y_{\alpha_1}| \qquad \text{y} \qquad \tilde{u}_D(Y) = |y_{\alpha_3} - y_{\alpha_2}|$$

LPI alternativa

Con esta especificación la “Ley de Propagación de Incertidumbre” se vuelve muy sencilla

Por ejemplo, si $Y = g(X)$ con $g(\cdot)$ una función monótona creciente, entonces

$$
\begin{aligned}
y_{\alpha_1} &= g(x_{\alpha_1}) \\
y_{\alpha_2} &= g(x_{\alpha_2}) \\
y_{\alpha_3} &= g(x_{\alpha_3})
\end{aligned}
$$

Bonus: Esta especificación alternativa de la incertidumbre mantiene su interpretación probabilística

$$\Pr(y_{\alpha_1} < Y < y_{\alpha_3}) = 0.68 \approx 2/3$$

Podemos elegir otros valores de α_1 y α_3. Por ejemplo, $\alpha_1 = 0.025$ y $\alpha_3 = 0.975$ son tales que

$$\Pr(y_{\alpha_1} < Y < y_{\alpha_3}) = 0.95$$

Comentarios finales

- Tanto los métodos frecuentistas como los bayesianos deben dar resultados adecuados si se aplican correctamente
- Independientemente del enfoque, es muy importante distinguir la teoría/metodología de la implementación.
- Más allá de la interpretación de la incertidumbre, los resultados deben ser equivalentes si se utiliza la misma información
- Una actitud pragmática puede redituar mucho
- Notación y terminología adecuadas para evitar ambigüedades (Willink, 2013)
- Capacitación (material didáctico, cursos, diplomados, talleres)
- Trabajo multidisciplinario
- Disponibilidad de software

Bibliografía

BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML. (2008). *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement.* JCGM 100:2008, GUM 1995 with minor corrections.
`http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/JCGM_100_2008_E.pdf`

BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML. (2008). *Supplement 1 to the 'Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement — Propagation of distributions using a Monte Carlo method.* JCGM 101:2008.
`http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/ JCGM_101_2008_E.pdf`

BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML. (2011). *Supplement 2 to the 'Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement' — Extension to any number of output quantities.* JCGM 102:2011.
`http://www.bipm.org/ utils/common/documents/jcgm/JCGM_102_2011_E.pdf`

Cox, M.G. & Harris, P.M. (2010). Software Support for Metrology: Best Practice Guide No. 6. Uncertainty Evaluation. *Technical Report MS 6*, National Physical Laboratory, Teddington, UK.

O'Hagan, A. (2014). Eliciting and using expert knowledge in metrology. *Metrologia* 51, S237-S244.

Willink, R. (2013). *Measurement Uncertainty and Probability.* Cambridge University Press.

¡Muchas gracias por su atención!