Η ΔΙΑΚΡΙΒΩΣΗ ΟΡΓΑΝΩΝ ΜΕΤΡΗΣΗΣ ΑΠΟ ΤΗ ΣΚΟΠΙΑ ΤΗΣ BAYESIAN ΑΝΑΛΥΣΗΣ

Ε. Μαθιουλάκης και Β. Μπελεσιώτης

Εργαστήριο Ηλιακών & άλλων Ενεργειακών Συστημάτων - ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

15310 Αγ. Παρασκευή Αττικής, e-mail: math@ipta.demokritos.gr

Περίληψη

Η Bayesian προσέγγιση των προβλημάτων που σχετίζονται με επεξεργασία δεδομένων σε συνθήκες αβεβαιότητας είναι σήμερα ευρέως αποδεκτή και αξιοποιείται σε ένα ευρύτατο φάσμα εφαρμογών, από τις κοινωνικές επιστήμες έως την επιδημιολογία ή την τεχνητή νοημοσύνη. Η ενσωμάτωσή της στην εργαλειοθήκη του μετρολόγου έχει οδηγήσει στη διεύρυνση των δυνατοτήτων ρεαλιστικής και αξιόπιστης αποτίμησης της αβεβαιότητας, ιδιαίτερα σε προβλήματα που η πειραματική - εμπειρική παρατήρηση αξιοποιείται στα πλαίσια μιας διαδικασίας συνεχούς βελτίωσης και αναβάθμισης της εικόνας που διαθέτει ο παρατηρητής για την αληθή τιμή του μετρούμενου μεγέθους. Σκοπός αυτής της εργασίας είναι να συζητήσει τις δυνατότητες αξιοποίησης της Bayesian προβληματικής στα πλαίσια της διακρίβωσης μετρητικού εξοπλισμού.

Στα πλεονεκτήματα της προσέγγισης αυτής συμπεριλαμβάνονται, εκτός από ένα πιο φυσικό τρόπο διαχείρισης της μετρολογικής πληροφορίας, η παραγωγή περισσότερο αξιόπιστων αποτελεσμάτων χαρακτηριζόμενων από μικρότερες αβεβαιότητες και διασφάλιση της συνάφειας μεταξύ διαδοχικών ανεξάρτητων πειραμάτων διακρίβωσης.

Παρουσιάζεται αρχικά το μεθοδολογικό πλαίσιο και οι μαθηματικές σχέσεις που επιτρέπουν την διαχείρισης της πληροφορίας για τις ανάγκες της Bayesian ανάλυσης. Στην συνέχεια εξετάζονται οι τρόποι κωδικοποίησης της υφιστάμενης (prior) γνώσης η οποία είναι ενδεχομένως διαθέσιμη από προηγούμενες παρατηρήσεις, θεωρητικές αναλύσεις ή συσσώρευση εμπειρία από τη χρήση του προς διακρίβωση μετρητικού εξοπλισμού. Παρουσιάζονται οι δυνατότητες και τα μαθηματικά εργαλεία που επιτρέπουν την ενσωμάτωση της πληροφορίας αυτής και το συνδυασμό της με τα αποτελέσματα της τρέχουσας διακρίβωσης με σκοπό την παραγωγή μια καμπύλης διακρίβωσης που θα περιγράφει ρεαλιστικά τη μετρολογική ταυτότητα της διάταξης μέτρησης. Δίδεται τέλος η εφαρμογή των παραπάνω μεθοδολογικών εργαλείων σε μια συγκεκριμένη περίπτωση διακρίβωσης ενός θερμομέτρου.

Λέξεις κλειδιά: Bayesian ανάλυση, διακρίβωση

Abstract

The adoption of the Bayesian approach for problems related with the elaboration of data under uncertainty conditions is commonly accepted at present time, while being implemented in a wide range of applications; the list is long, from social sciences up to epidemiology or artificial intelligence. Integration of the Bayesian approach into the metrologist's methodological tools has allowed the expansion of the potential for reliably assessing uncertainty, especially in problems where experimental - empirical observation is exploited within the context of a procedure of continuous improvement and upgrade of

the knowledge of the observer for the true value of the measured quantity. The proposed work aims at discussing the perspectives of Bayesian approach with regard to the concept of metrological equipment calibration. Within the advantages of the specific approach, apart from a more physical way of treating the metrological information, special mention should be made to the production of more reliable results, characterized by lower uncertainties, as well as to the assurance of the relevance between consecutive independent calibration experiments.

Initially, the methodological framework and the mathematical relations allowing the elaboration of information for the needs of Bayesian analysis are presented. The encoding modes of the existent (prior) knowledge, potentially available from previous observations, theoretical analysis or accumulation of experience through the use of the calibrated instrumentation, are examined. Subsequently, the analysis discusses the capabilities and mathematical tools allowing the integration of the respective information, in combination with the results of the current calibration procedure, aiming at the production of a calibration curve, realistically describing the metrological identity of the measuring set-up. Finally, the implementation of the above into a specific case of a thermometer calibration, is presented.

Keywords: Bayesian analysis, calibration

1. Εισαγωγή

Η διακρίβωση αφορά στην πραγματικότητα την εύρεση μιας επιστημονικά έγκυρης και λειτουργικά αξιοποιήσιμης συσχέτισης μεταξύ των ενδείξεων μιας διάταξης μέτρησης και της «αληθινής» τιμής του μετρούμενου. Πρόκειται δηλαδή για μια διαδικασία αντιστοίχισης του πραγματικού με το ενδεικνυόμενο, μέσω της οποίας γίνεται προσπάθεια άρσης των σφαλμάτων που οφείλονται στις επιδράσεις διαφόρων εξωγενών ή ενδογενών παραμέτρων. Ζητούμενο βεβαίως δεν είναι μόνο να βρεθεί η σχέση διακρίβωσης αυτή-καθαυτή, αλλά και να εκτιμηθούν οι κάθε είδους αβεβαιότητες που χαρακτηρίζουν τη μελλοντική της χρήση, συμπεριλαμβανομένων αυτών που αφορούν την ανθεκτικότητά της στο χρόνο (GUM, 2008). Από μια γενικότερη άποψη, διακρίβωση είναι μια προσπάθεια αναβάθμισης της γνώσης που διαθέτουμε για τη σχέση ενός φυσικού μεγέθους με την ποσοτική ένδειξη που παρέχεται από μια διάταξη μέτρησης, συμπεριλαμβανομένης της εκτίμησης του εύρους των σφαλμάτων που είναι πιθανό να συνοδεύουν τη μελλοντική χρήση της σχέσης αυτής (Dietrich, 1991).

Η σχέση διακρίβωσης καλείται εύλογα να αποδείξει την ανθεκτικότητά της στο χρόνο, μέσω της περιοδικής επανάληψης της όλης διαδικασίας η οποία οδηγεί στη διαμόρφωση του μετρολογικού προφίλ της συσκευής μέτρησης. Πρόκειται δηλαδή για μια διαδικασία συνεχούς επικαιροποίησης της σχέσης διακρίβωσης, μέσω της διαρκούς ενσωμάτωσης των δεδομένων της τελευταίας διακρίβωσης. Από την άποψη αυτή, η Bayesian ανάλυση παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα, στο βαθμό που δίνει τη δυνατότητα συνδυαστικής αξιοποίησης κάθε είδους γνώσης σχετικά με ένα μέγεθος, τόσο προϋπάρχουσας όσο και νέας.

Η ενσωμάτωση της προηγούμενης γνώσης στην τρέχουσα εικόνα δεν είναι πάντα εύκολη και απαιτεί την σχολαστική εφαρμογή κατάλληλου μεθοδολογικού πλαισίου. Οδηγεί όμως πάντα σε ρεαλιστικότερες εκτιμήσεις, χαρακτηριζόμενες από μικρότερες

αβεβαιότητας, ενώ σε πολλές περιπτώσεις είναι απαραίτητη για την κατανόηση και νοηματοδότηση των αποτελεσμάτων της παρατήρησης. Επιτρέπει επιπλέον την αποκατάσταση μιας συνέχειας ανάμεσα στα αποτελέσματα διαδοχικών παρατηρήσεων, διαμορφώνοντας ένα λογικό πλαίσιο ενσωμάτωσης της κάθε μιας από αυτές. Για το λόγο αυτό εξάλλου μπορεί να αποτελέσει ένα αποτελεσματικό εργαλείο στον τομέα της διακρίβωσης, όπου εύλογα μπορεί να υποτεθεί ότι το ιστορικό διακρίβωσης ενός οργάνου έχει βαρύνουσα σημασία για τη διαμόρφωση της μετρολογικής του ταυτότητας.

Σε πρακτικό επίπεδο, το πρόβλημα εστιάζεται κατ' αρχήν στην επιλογή της κατάλληλης «εκ των προτέρων κατανομής» (prior Distribution) και, στη συνέχεια, στους απαιτούμενους υπολογισμούς.

Το πρόβλημα της διακρίβωσης ανάγεται στην πραγματικότητα στην εύρεση μιας συσχέτισης μεταξύ των ενδείξεων, y_i, μιας συσκευής μέτρησης και των αντίστοιχων τιμών αναφοράς, x_i, τις οποίες θα έδινε μια ιδεατή μετρητική διάταξη απαλλαγμένη από σφάλματα (Mathioulakis and Belessiotis, 2000):

$$y_i = f_{\boldsymbol{\theta}}(x_i) + \epsilon_i,\ i=1,\ldots,n \qquad (1)$$

όπου $f_{\boldsymbol{\theta}}(x_i)$ είναι μια συνάρτηση διακρίβωσης με άγνωστους παραμέτρους $\boldsymbol{\theta} = \left(\theta_1, \ldots, \theta_p\right)^T$ με τα $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_1, \ldots, \epsilon_n)^T$ να αντιπροσωπεύουν τα σφάλματα τα οποία ακολουθούν μια κατανομή $p(\boldsymbol{\epsilon}|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta})$.

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας οι τιμές αναφοράς, x_i, θεωρούνται ως γνωστές με αμελητέα αβεβαιότητα και ότι τα σφάλματα ακολουθούν μια μονομεταβλητή (univariate) κατανομή.

Ένα παράδειγμα είναι καμπύλη διακρίβωσης τύπου γραμμικής ευθείας η οποία περιγράφει τη σχέση μεταξύ των ιχνηλάσιμων τιμών αναφοράς, x_i, ενός υψηλής ακρίβειας προτύπου και των ενδείξεων, y_i, της υπό διακρίβωση συσκευής:

$$y_i = \theta_1 + \theta_2 x_i + \epsilon_i,\ \epsilon_i \sim N(0, \sigma^2), \quad i=1,\ldots,n \qquad (2)$$

Στόχος είναι η εκτίμηση των αγνώστων παραμέτρων $\boldsymbol{\theta} = \left(\theta_1, \ldots, \theta_p\right)^T$ και των επίσης άγνωστων παραμέτρων μεταβλητότητας $\boldsymbol{\delta}$ που χαρακτηρίζουν τα $\boldsymbol{\theta}$ (Fuller, 1987).

Το πρόβλημα αυτό έχει απασχολήσει συχνά την σχετική βιβλιογραφία, αν και συνήθως από τη σκοπιά των τεχνικών της γραμμικής παλινδρόμησης (linear regression). Το ζήτημα της καμπύλης διακρίβωσης παραπέμπει στο γενικότερο πρόβλημα της συσχέτισης δεδομένων το οποίο έχει απασχολήσει συχνά τη στατιστική και για την επίλυση του οποίου είναι διαθέσιμες διάφορες μεθοδολογικές προσεγγίσεις. Μια δημοφιλής προσέγγιση είναι η χρήση των εκτιμητών μέγιστης πιθανοφάνειας (maximum likelihood estimators), η οποία συνίσταται στην εύρεση των τιμών των παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}$ για τις οποίες μεγιστοποιείται η συνάρτηση πιθανοφάνειας, καθώς της μεταβλητότητας που συνοδεύει τις τιμές αυτές (Krystek, 2007).

Η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων αποτελεί τη συχνότερα χρησιμοποιούμενη και την απλούστερη τεχνική. Στην απλούστερή της μορφή επιδιώκεται η εύρεση των τιμών των παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}$ για τις οποίες ελαχιστοποιείται η ποσότητα $\sum(y_i - f_{\boldsymbol{\theta}}(x_i))^2$. Αν και εν

γένει η μέθοδος αυτή οδηγεί σε διαφορετικά αποτελέσματα από αυτή των εκτιμητών μέγιστης πιθανοφάνειας, στην περίπτωση δεδομένων που χαρακτηρίζονται από σφάλματα που ακολουθούν κανονική κατανομή με σταθερή μεταβλητότητα τα αποτελέσματα ταυτίζονται.

2. Η Bayesian προσέγγιση

Στο βαθμό που υπάρχει μια προηγούμενη γνώση σχετικά με τα $\boldsymbol{\theta}$ και $\boldsymbol{\delta}$, ζητούμενο είναι να αξιοποιηθεί η γνώση αυτή ώστε, σε συνδυασμό με τα δεδομένα x_i και y_i που προκύπτουν από μια πρόσφατη διακρίβωση να προκύψει μια επικαιροποιημένη εικόνα για την καμπύλη διακρίβωσης. Αυτό μπορεί εν γένει να γίνει με τη βοήθεια του θεωρήματος του Bayes (Bolstad, 2004):

$$\pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}|\boldsymbol{y}) \propto \pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}) \times l(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}; \boldsymbol{y}) \qquad (3)$$

όπου $\pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta})$ είναι η prior κατανομή που εκφράζει την υφιστάμενη γνώση, $l(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}; \boldsymbol{y})$ είναι η πιθανοφάνεια (Likelihood) και $\pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}|\boldsymbol{y})$ η επικαιροποιημένη κατανομή, μετά την ενσωμάτωση της προηγούμενης γνώσης και των αποτελεσμάτων της πειραματικής διαδικασίας της διακρίβωσης. Η πιθανοφάνεια $l(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}; \boldsymbol{y})$ αντιστοιχεί στην πραγματικότητα στο στατιστικό μοντέλο που περιγράφει τη σχέση μεταξύ των εμπειρικών δεδομένων και παραμέτρων που δυνητικά επηρεάζουν τη διαμόρφωση των δεδομένων αυτών.

Η έννοια του στατιστικού μοντέλου είναι βασικό στοιχείο στην Bayesian ανάλυση, στο βαθμό που καλείται να περιγράψει τη σχέση μεταξύ των παρατηρήσεων $\boldsymbol{y}$ και των παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}$ και $\boldsymbol{\delta}$. Γίνεται δηλαδή η υπόθεση ότι οι παρατηρήσεις είναι ένα τυχαίο δείγμα από ένα σύνολο δεδομένων που περιγράφεται στατιστικά από την κατανομή $p(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta})$, κατανομή που εμφανίζεται κατά την εφαρμογή του θεωρήματος του Bayes ως η συνάρτηση πιθανοφάνειας $l(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}; \boldsymbol{y})$. Για τον ορισμό του στατιστικού αυτού μοντέλου, είναι αναγκαίο να δηλωθεί τόσο η συνάρτηση συσχέτισης $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x})$ όσο και η κατανομή των σφαλμάτων $p(\boldsymbol{\epsilon}|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta})$. Για παράδειγμα, στην περίπτωση της σχέσης 2 όπου υιοθετείται η ευθεία ως καμπύλη διακρίβωσης με τα σφάλματα να θεωρούνται ότι ακολουθούν κανονική κατανομή με μέση τιμή μηδέν και μεταβλητότητα $\boldsymbol{\sigma}^2$, το στατιστικό μοντέλο βασίζεται στη δειγματική κατανομή:

$$p(\boldsymbol{y}|\theta_1, \theta_2, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \theta_1 - \theta_2 x_i)^2} \qquad (4)$$

Η επιλογή του κατάλληλου στατιστικού μοντέλου, άρα και της κατάλληλης συνάρτησης διακρίβωσης, μπορεί να βασιστεί είτε στη γνώση των φυσικών φαινομένων που καθορίζουν την απόκριση της συσκευής μέτρησης, είτε σε φαινομενολογικές παρατηρήσεις που οδηγούν στη γνώση της μορφής της συνάρτησης αυτής. Σε κάθε περίπτωση, σημαντικό ρόλο καλείται να έχει η εμπειρία του μετρολόγου, όσον αφορά ζητήματα όπως η κανονικότητα ή μη των παρατηρήσεων, η ενδεχόμενη ασυμμετρία τους, η μεταξύ τους ανεξαρτησία, η πιθανή ετεροσκεδαστικότητά τους κλπ.

Μετά την υλοποίηση των παρατηρήσεων (x_i, y_i), η εκ των υστέρων (posterior) κατανομή $\pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}|\boldsymbol{y})$, η οποία είναι μια υπό συνθήκη (conditional) κατανομή, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εκτιμηθούν οι επικαιροποιημένες τιμές των παραμέτρων $\boldsymbol{\theta}$ και $\boldsymbol{\delta}$. Έτσι, η γνώση που αποκτήθηκε για το $\boldsymbol{\theta}$ μπορεί να εκφραστεί από την περιθώρια (marginal) κατανομή (Kacker, 2003):

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \int \pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta}|\boldsymbol{y})\, d\boldsymbol{\delta} \tag{5}$$

Η γνώση αυτή μπορεί να συνοψιστεί από την καλύτερη εκτίμηση $E(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y})$ και τη συμμεταβλητότητα $Cov(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y})$:

$$E(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \int \boldsymbol{\vartheta}\, \pi(\boldsymbol{\vartheta}, \boldsymbol{\delta}|\boldsymbol{y})\ d\boldsymbol{\vartheta} \tag{6}$$

$$Cov(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \int \big(\boldsymbol{\vartheta} - E(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y})\big)\big(\boldsymbol{\vartheta} - E(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y})\big)^T \pi(\boldsymbol{\vartheta}, \boldsymbol{\delta}|\boldsymbol{y})\ d\boldsymbol{\vartheta} \tag{7}$$

Όπως ήδη αναφέρθηκε, από τη στιγμή που είναι γνωστά το στατιστικό μοντέλο και η εκ των προτέρων κατανομή είναι δυνατόν να προσδιοριστεί και η εκ των υστέρων κατανομή Δεδομένου δε ότι το ολοκλήρωμα της εκ των υστέρων κατανομής οφείλει να είναι ίσο με τη μονάδα, η διαδικασία περιλαμβάνει τον υπολογισμό της σταθεράς κανονικοποίησης (normalization constant).

Για ορισμένες απλές μορφές των κατανομών αυτό μπορεί να γίνει αναλυτικά, στην γενική όμως περίπτωση απαιτούνται αριθμητικοί υπολογισμοί και ολοκληρώσεις. Για τους υπολογισμούς αυτούς είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν διάφορες μέθοδοι, συμπεριλαμβανομένης της χρήσης προσομοίωσης Monte-Carlo, και ειδικότερα η προσέγγιση Marcov Chain Monte Carlo (MCMC) η οποία έχει αποδειχθεί ιδιαιτέρα αποτελεσματική για αυτού του τύπου τα προβλήματα. Σε αντίθεση με τη συνήθη μέθοδο Monte-Carlo, η MCMC επιτρέπει την απόκτηση ενός δείγματος από μια κατανομή χωρίς να εξαχθούν ανεξάρτητες υλοποιήσεις της κατανομής αυτής. Ένας βασικός αλγόριθμος για την εφαρμογή της MCMC είναι ο Metropolis-Hastings.

3. Εκ των προτέρων κατανομές

Η εκ των προτέρων κατανομή $\pi(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\delta})$ εκφράζει την διαθέσιμη γνώση για τα $\boldsymbol{\theta}$ και $\boldsymbol{\delta}$ πριν από την ανάκτηση των δεδομένων (x_i, y_i) της διακρίβωσης. Η γνώση αυτή, στο βαθμό που είναι διαθέσιμη, αποκαλείται *πληροφοριακή εκ των προτέρων* (informative prior) και μπορεί να προέρχεται, για παράδειγμα, από επιστημονικές μελέτες, γνώμες ειδικών, προηγούμενες διακριβώσεις, ιστορικά στοιχεία χρήσης της συσκευής ή κατάλληλη πειραματική διερεύνηση. Σε πολλές όμως περιπτώσει η γνώση αυτή είτε απουσιάζει, είτε είναι πολύ ασαφής για να είναι αξιοποιήσιμη, και οδηγεί στη χρήση *μη-πληροφοριακή* (noninformative) εκ των προτέρων κατανομών.

Στην περίπτωση της διακρίβωσης, η απλούστερη μορφή προϋπάρχουσας γνώσης μπορεί να αντληθεί από το ιστορικό διακρίβωσης της υπό διακρίβωσης συσκευής, όταν αυτό

είναι διαθέσιμο. Συχνά όμως η προϋπάρχουσα πληροφορία είναι ελλιπής, με αποτέλεσμα να υπάρχουν πολλές εναλλακτικές επιλογές ως προς την καταλληλότερη κατανομή. Στις περιπτώσεις αυτές επιβάλλεται η διαδικασία να επαναληφθεί για όλες τις πιθανές επιλογές στα πλαίσια μιας παραμετρικής μελέτης ευαισθησίας, ώστε να αξιολογηθεί το κατά πόσο είναι εφικτή η εξαγωγή βάσιμων συμπερασμάτων ή είναι αναγκαία η αναζήτηση επιπλέον πληροφοριών.

Συνήθης είναι η περίπτωση διαθέσιμης πληροφορίας με τη μορφή ενός διαστήματος στο οποίο περιέχεται το μέγεθος, στην περίπτωσή μας το $\boldsymbol{\theta}$, για ένα δεδομένο επίπεδο εμπιστοσύνης, π.χ. 95%. Η αξιοποίηση της πληροφορίας αυτής επιβάλει την επιλογή μιας κατανομής, τα ποσοτικά χαρακτηριστικά της οποίας είναι συμβατά με το εν λόγω διάστημα. Είναι πιθανό, εάν δεν υπάρχουν σαφείς πληροφορίες για την ακριβή μορφή της κατανομής, να πρέπει να γίνει επιλογή της πλέον κατάλληλης, με κριτήρια που εξαρτώνται από τα κατά περίπτωση διαθέσιμα στοιχεία. Για παράδειγμα, για μια παράμετρο που μεταβάλλεται από μηδέν έως ένα, μια κατάλληλη επιλογή θα ήταν η κατανομή beta, στην περίπτωση μιας μεταβλητής που παίρνει μόνο θετικές τιμές μια κατανομή Gamma, ενώ για την παράμετρο μεταβλητότητας συνήθως επιλέγεται για κατανομή Inverse Gamma. Σημειώνεται επιπλέον ότι στην περίπτωση συσχετιζόμενων παραμέτρων, η επιλογή μιας από κοινού (joint) κατανομής είναι επιβεβλημένη. Τέλος, μια άλλη ενδιαφέρουσα επιλογή συνίσταται στη χρήση των αποκαλούμενων συζυγών εκ των προτέρων (conjugate priors) κατανομών, δηλαδή που είναι ίδιας μορφής τόσο για την εκ των προτέρων όσο και για την εκ τω υστέρων κατανομή (Elster, 2013).

4. Γραμμική καμπύλη διακρίβωσης

Η χρησιμοποίηση μια γραμμικής σχέσης της μορφής της εξίσωσης 2 για τη διόρθωση της ένδειξης μιας συσκευής μέτρησης συνιστά ευρέως διαδεδομένη μετρολογική πρακτική. Η αξιοποίηση των αποτελεσμάτων της διακρίβωσης προϋποθέτει την εκτίμηση όχι μόνο των τιμών των συντελεστών θ_1 και θ_2, αλλά και της μεταβλητότητας και συμμεταβλητότητας που χαρακτηρίζει αυτές τις τιμές. Σε μορφή πινάκων, το πρόβλημα που εξετάζεται εδώ μπορεί να γραφεί ως ακολούθως:

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\theta} + \boldsymbol{\epsilon},\ \boldsymbol{\epsilon} \sim N(\boldsymbol{0}, \sigma^2 I),\ \boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ . & . \\ . & . \\ . & . \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \tag{8}$$

Να σημειωθεί ότι η παραπάνω εξίσωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για άλλα γραμμικά στατιστικά μοντέλα, όπως π.χ. αυτά που εμπλέκουν πολυωνυμικές ή άλλες συναρτήσεις, με τον πίνακα $\boldsymbol{X}$ να είναι διαστάσεων $n\ x\ p$, με $n>p$.

Παραμένοντας στην υπόθεση ότι οι παρατηρήσεις είναι ανεξάρτητες και τα σφάλματα κανονικά κατανεμημένα με σταθερή μεταβλητότητα, η συνάρτηση πιθανοφάνειας γράφεται:

$$l(\boldsymbol{\theta}, \sigma^2;\ \boldsymbol{y}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\theta})^T(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\theta})} \tag{9}$$

Όπως προαναφέρθηκε, η εκ των προτέρων κατανομή για το $\boldsymbol{\theta}$ θα πρέπει να επιλεγεί με κριτήριο την αξιοποίηση της κατά περίπτωση υφιστάμενης γνώσης. Στα πλαίσια αυτά, μια ενδιαφέρουσα επιλογή συνίσταται στη χρήση ως εκ των προτέρων κατανομής των συντελεστών της καμπύλης διακρίβωσης που ίσχυαν μέχρι τη στιγμή που επιχειρήθηκε η τελευταία διακρίβωση.

Στις περιπτώσεις που η πληροφορία αυτή είτε δεν υπάρχει, είτε δεν θεωρείται αξιοποιήσιμη, η εκ των προτέρων κατανομή χρειάζεται να εκτιμηθεί στη βάση υποθέσεων εργασίας συμβατών με τα χαρακτηριστικά της συσκευής μέτρησης. Σε ότι αφορά την εκ των προτέρων κατανομή για το σ, μια ρεαλιστική επιλογή θεωρείται μια κανονική αντίστροφη Gamma (Normal Inverse Gamma, NIG) η οποία είναι συζυγής (conjugate) του στατιστικού μοντέλου που επιλέχθηκε, με μέση τιμή $\boldsymbol{\theta}_o$ και πίνακα μεταβλητότητας $\sigma^2\boldsymbol{V}_o$, με το σ^2 να είναι μια Inverse Gamma (IG) κατανομή με παραμέτρους μορφής a_0 και κλίμακας β_O:

$$\boldsymbol{\theta} \sim N(\boldsymbol{\theta}_o, \sigma^2\boldsymbol{V}_o),\ \sigma^2 = IG(a_0, \beta_O) \tag{10}$$

Η επιλογή των a_0 και β_O πρέπει να γίνει με τρόπο που να εκφράζεται κατά το δυνατόν πιστότερα η προϋπάρχουσα γνώση για το σ. Όσον αφορά στα $\boldsymbol{\theta} = (\theta_{\mathbf{1}}, \theta_{\mathbf{2}})^{\boldsymbol{T}}$, μια κατ' αρχήν λογική επιλογή είναι η $\boldsymbol{\theta} = (0,1)^T$ η οποία αντιστοιχεί σε απουσία απόκλισης κατά μέσο όρο (μηδενική μετατόπιση και κλίση ίση με τη μονάδα). Όσον αφορά τον πίνακα μεταβλητότητας $\boldsymbol{V}_o$, αυτός μπορεί να εκτιμηθεί γνωρίζοντας τη μεταβλητότητα σ^2 και τις αβεβαιότητες που μπορούν εύλογα να αποδοθούν στις τιμές των θ_1 και $\theta_{\mathbf{2}}$.

Στην περίπτωση που επιλεγεί μία μη-πληροφοριακή εκ των προτέρων κατανομή, συνήθως χρησιμοποιείται η:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}, \sigma^2) \propto 1/\sigma^2 \tag{11}$$

η οποία ισοδυναμεί με ένα συζυγές εκ των προτέρων για το οποίο $a_0 = -p/2$, $\beta_O = 0$ και $\boldsymbol{V}_o^{-1} \to 0$.

Η χρήση ενός συζυγούς εκ τω προτέρων επιτρέπει τον αναλυτικό υπολογισμό της εκ των υστέρων κατανομής. Στην περίπτωση που χρησιμοποιείται μια κανονική αντίστροφη Gamma (NIG) κατανομή για την εκ των προτέρων πληροφορία, και η εκ των υστέρων κατανομή θα είναι μια NIG (Elster et al, 2015):

$$\boldsymbol{\theta}, \sigma^2 | \boldsymbol{y} \sim NIG(\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{V}_1, \alpha_1, \beta_1,) \tag{12}$$

$$\boldsymbol{V}_1 = (\boldsymbol{V}_o^{-1} + \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1},\ \boldsymbol{\theta}_1 = \boldsymbol{V}_1(\boldsymbol{V}_o^{-1}\boldsymbol{\theta}_o + \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}),\ \alpha_1 = \alpha_o + \frac{n}{2},\ \beta_1 = \beta_o + \frac{\boldsymbol{\theta}_o^T\boldsymbol{V}_o^{-1}\boldsymbol{\theta}_o + \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\theta}_1^T\boldsymbol{V}_1^{-1}\boldsymbol{\theta}_1}{2}$$

Η περιθώρια (marginal) εκ των υστέρων κατανομή για το $\boldsymbol{\theta}$ είναι μια student κατανομή με ν=$2\alpha_1$ βαθμούς ελευθερίας:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) \propto \left(1 + \frac{(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}_1)^T\left(\beta_1/\alpha_1 \boldsymbol{V}_1\right)^{-1}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}_1)}{2\alpha_1}\right)^{-(\alpha_1+1)} \tag{13}$$

Η μέση τιμή (καλύτερη εκτίμηση) και η αβεβαιότητα (μεταβλητότητα) μπορούν επομένως να υπολογιστούν με βάση τις σχέσεις:

$$E(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{\theta}_1 \tag{14}$$

$$\boldsymbol{Cov}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \frac{\beta_1}{\alpha_1 - 1}\boldsymbol{V}_1 \tag{15}$$

4. Παράδειγμα εφαρμογής

Ως παράδειγμα εφαρμογής δίδεται η διακρίβωση ενός θερμομέτρου στην περιοχή από 10ºC έως 90 ºC. Τα δεδομένα της διακρίβωσης δίδονται στον πίνακα Ι που ακολουθεί, όπου το $\boldsymbol{X}$ αντιπροσωπεύει τις τιμές της θερμοκρασίας αναφοράς και το $\boldsymbol{Y}$ τις ενδείξεις του υπό διακρίβωση θερμομέτρου. Για τις ανάγκες της εφαρμογής αυτής γίνεται η υπόθεση ότι τα σφάλματα μπορούν να θεωρηθούν ότι ακολουθούν κανονική κατανομή με μέση τιμή μηδέν και μεταβλητότητα σ^2. Σημειώνεται όμως ότι ανάλογοι υπολογισμοί είναι δυνατοί και για τη γενική περίπτωση δεδομένων με αβεβαιότητες και στις δύο μεταβλητές οι οποίες διαφέρουν από σημείο σε σημείο (Lira and Grientschnig, 2017).

Πίνακας Ι. Δεδομένα διακρίβωσης

$\boldsymbol{X}$ [ºC]	10.36	21.39	33.40	44.37	56.12	67.34	79.33	90.48
$\boldsymbol{Y}$ [ºC]	18.13	31.13	36.18	47.18	61.63	68.03	75.08	83.67

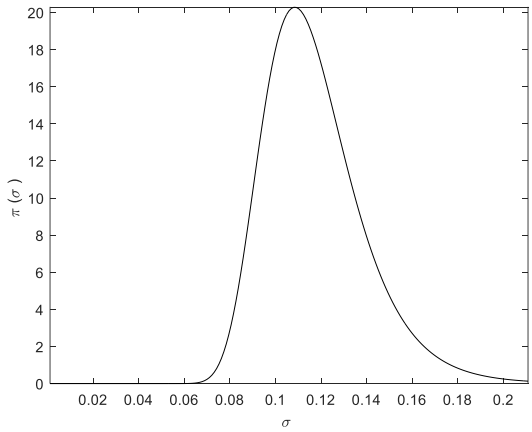
Η εκ των προτέρων γνώση για τους συντελεστές $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2)^T$ προέρχεται από τα δεδομένα της προηγούμενης διακρίβωσης και συνοψίζεται, για το παράδειγμά μας, στα θ_1=9.8ºC και θ_2=0.87, με τις τυπικές τους αβεβαιότητες να είναι $u(\theta_1)$=0.5ºC και $u(\theta_2)$=0.03 αντίστοιχα. Ο πίνακας μεταβλητότητας $\sigma^2\boldsymbol{V}_o$ προκύπτει, επιλέγοντας το σ^2 να είναι μια Inverse Gamma (IG) κατανομή με παραμέτρους μορφής a_0 =8.0 και κλίμακας $\beta_O = 0.1$. Υποθέτοντας μηδενική συσχέτιση, τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα $\boldsymbol{V}_0$ είναι $0.5^2/0.1^2$=25 και $0.03^2/0.1^2$=0.09:

$$\boldsymbol{V}_0 = \begin{vmatrix} 25 & 0 \\ 0 & 0.09 \end{vmatrix}$$

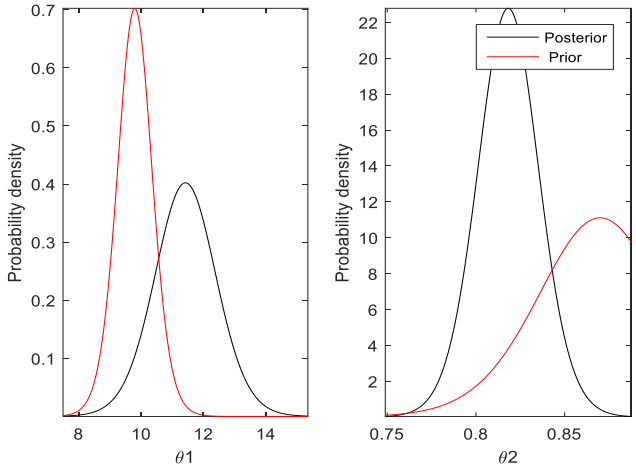
Η μορφή της αρχικής κατανομής για το *σ* φαίνεται στο σχήμα 1.

Εφαρμόζοντας τις σχέσεις που προαναφέρθηκαν για την περίπτωση μιας κατανομής που είναι συζυγής του στατιστικού μοντέλου που επιλέχθηκε, μπορεί να εκτιμηθεί η επικαιροποιημένη στατιστική εικόνα των συντελεστών του μοντέλου διακρίβωσης. Το

αποτέλεσμα φαίνεται χαρακτηριστικά στο σχήμα 2, συγκριτικά με την προηγούμενη εικόνα των συντελεστών. Οι νέες τιμές των συντελεστών διακρίβωσης και πίνακας μεταβλητότητάς τους είναι:



Σχήμα 1. Αντίστροφη κατανομή Gamma για το σ.



Σχήμα 2. Εκ τω προτέρων και επικαιροποιημένη κατανομή για τους συντελεστές διακρίβωσης.

$$\boldsymbol{\theta}_1 = E(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \begin{vmatrix} \theta_{11} \\ \theta_{12} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 11.42 \\ 0.82 \end{vmatrix} \qquad \boldsymbol{Cov}(\boldsymbol{\theta}_1) = \boldsymbol{Cov}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{y}) = \begin{vmatrix} 1.05 & -0.016 \\ -0.016 & 0.0003 \end{vmatrix} \tag{16}$$

Με όρους πιθανότερης τιμής και τυπικής αβεβαιότητας, έχουμε επομένως $\theta_{11} = 11.42$ ^{o}C, $\theta_{12} = 0.82$, $u(\theta_{11}) = 1.02$ ^{o}C **και** $u(\theta_{11}) = 0.054$, ενώ υπάρχει και συσχέτιση μεταξύ των δύο συντελεστών $u(\theta_{11}, \theta_{12}) = -0.016$.

5. Συμπεράσματα

Η Bayesian ανάλυση αξιοποιείται σήμερα για την επίλυση προβλημάτων σε ένα ευρύ

φάσμα εφαρμογών, αξιοποιώντας και τις δυνατότητες των σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων. Στον τομέα της μετρολογίας, όπου η ποσοτική παρατήρηση συνοδεύεται εκ των πραγμάτων από σφάλματα και καλείται να αξιοποιηθεί σε συνθήκες αβεβαιότητας, η Bayesian ανάλυση μπορεί να συμβάλει στη διαμόρφωση μια πιο ρεαλιστικής προσέγγισης για το μετρούμενο μέγεθος στη βάση της επικαιροποίησης των διαθέσιμων ποσοτικών δεδομένων. Στα πλαίσια αυτά, με την παρούσα εργασία επιχειρήθηκε η διατύπωση μιας μεθοδολογικής προσέγγισης του προβλήματος της διακρίβωσης των οργάνων μέτρησης, εστιάζοντας στην αξιοποίηση των αποτελεσμάτων της διακρίβωσης σε συνδυασμό με την προϋπάρχουσα μετρολογικής τους ιστορίας. Από τα αποτελέσματα προκύπτει ότι η προσέγγιση αυτή μπορεί να συμβάλει στη διασφάλιση της συνοχής της μετρολογικής εικόνας του εξοπλισμού από τη μια διακρίβωση στην επόμενη και, εν τέλει, στην αξιοπιστία των αποτελεσμάτων της διακρίβωσης.

Βιβλιογραφία

GUM, BIPM, IEC, IFCC, ILAC, ISO, IUPAC, IUPAP, and OIML, “Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement”, Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 100, 2008.

Dietrich C. F., “Uncertainty, Calibration and Probability”, 1991, 2nd ed., Bristol: Hilger.

Fuller W. A., “Measurement Error Models”, 1987, New York: Wiley.

Mathioulakis E., Belessiotis V., “Uncertainty and traceability in calibration by comparison”, Meas. Sci. Technol., Vol. 11, pp. 771–775, 2000.

Krystek M., Anton M., “A weighted total least-squares algorithm for fitting a straight line”, Meas. Sci. Technol., 18 3438–3442, 2007.

Bolstad M. W., “Introduction to Bayesian Statistics”, 2004, New Jersey: Wiley-Interscience.

Kacker R. and Jones A., "On use of Bayesian statistics to make the Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement consistent", Metrologia, Vol. 40, pp. 235–248, 2003.

Elster C., “Bayesian uncertainty analysis compared with the application of the GUM and its supplements”, Metrologia, vol. 51, pp. 159-166, 2013.

Elster C., Klauenberg K., Walzel M., Wubbeler G., Harris P., Cox M., Matthews C., Smith I., Wright L., Allard A., Fischer N., Cowen S., Ellison S., Wilson P., Pennecchi F., Kok G., Van der Veen A., Pendrill L., «A Guide to Bayesian Inference for Regression Problems», Deliverable of EMRP project NEW04, 2015.

Lira I. and Grientschnig D., “Error-in-variables models in calibration”, Metrologia 54, pp. 133-145, 2017.