

# A metodologia Bayesiana no Problema de Calibração

M.A. Amaral Turkman

Centro de Estatística e Aplicações  
Departamento de Estatística e Investigação Operacional  
Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa

Metrologia Científica na Investigação Desenvolvimento e Inovação (IDI)  
Instituto Português da Qualidade  
IPQ, 4 de Dezembro de 2012, Caparica

**FCT** *This research has been partially supported by National Funds through FCT —  
Fundação para a Ciência e a Tecnologia, project PEst-OE/MAT/UI0006/2011*

## Tópicos da comunicação

# Tópicos

- O problema da calibração estatística.
- A Metodologia Bayesiana.
  - ① Informação *a priori*;
  - ② Informação *a posteriori*.
- A Metodologia Bayesiana no problema da calibração.
- Exemplo de aplicação
- Discussão.

# O problema da calibração

# Calibração Estatística

A calibração estatística ou regressão inversa é um método caracterizado estatisticamente por duas variáveis  $Y$  e  $X$ , tais que:

- A variável dependente  $Y$  está relacionada com  $X$  através de um modelo estatístico especificado por uma função densidade de probabilidade,  $f(y|X, \theta)$ , condicional a  $X$  e a um vector de parâmetros desconhecido  $\theta$ .
- A variável  $X$  pode ser uma quantidade fixada, imposta pelo experimentador (controlada ou por desenho experimental), com ou sem erro de medida, pode ser observacional ou resultante de uma experiência natural.
- O modelo mais simples é, por exemplo, aquele em que  $Y$  está linearmente relacionada com  $X$ , isto é,  $Y = \alpha + \beta X + \epsilon$  em que  $\epsilon$  é um erro aleatório, que em geral se admite ter uma distribuição normal com média zero e variância desconhecida  $\sigma^2$ .

# Metodologias da Calibração Estatística

Uma revisão da literatura sobre calibração estatística em

Osborne, C. (1991) Statistical Calibration: A Review. *International Statistical Review*, **59**, 309-336

- Abordagem clássica
- Abordagem não paramétrica
- Abordagem Bayesiana

Recentemente

Hernandez, N, Biscay, R.J., Talavera, I (2012) A non-Bayesian predictive approach for statistical calibration. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, **82**, 529-545

# Objectivo da Calibração Estatística

- Dada uma **nova observação** de  $Y$ , digamos  $y_0$  (ou vários valores  $y_{01}, \dots, y_{0m}$ ) correspondente a um **valor  $x_0$  desconhecido de  $X$** , o **objectivo é fazer inferências sobre  $x_0$**  com base no modelo estatístico considerado.
- Para fazer inferência precisamos de ter uma **amostra**  $\mathcal{D} = (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$  de observações independentes (**amostra de treino - experiência de calibração**) para construir o modelo.
- A diferença das abordagens clássica e bayesiana, reside essencialmente
  - na informação utilizada na construção do modelo
  - no modo de realizar a inferência
  - na interpretação da inferência.

## Calibração Estatística e metodologia clássica

- Na metodologia clássica o modelo  $f(y|x, \theta)$  é estimado à custa dos dados  $\mathcal{D}$  usando, por exemplo, o método da máxima verosimilhança.
- Usando a relação existente entre  $Y$  e  $X$ , obtém-se um estimador para o valor desconhecido  $x_0$ .
- A incerteza sobre esse estimador é caracterizada pela sua distribuição de amostragem.
- No caso mais simples em que existe uma relação linear entre  $Y$  e  $X$  o problema tem uma solução relativamente simples, mas sem deixar de ser controversa.



## Breve referência à abordagem clássica

No caso do modelo linear  $Y = \alpha + \beta X + \epsilon$

- A crítica ao estimador clássico,

$$\hat{x}_0 = \bar{x} + \frac{\text{var}(x)}{\text{cov}(y, x)}(y_0 - \bar{y})$$

resultante da inversão da da recta  $y = \hat{\alpha} + \hat{\beta}x$  estimada por máxima verosimilhança, é não ter uma **média definida** e ter um **erro quadrático médio infinito**.

- Outra solução apresentada, mas **não isenta de fortes críticas**, é o estimador obtido por regressão inversa

$$\hat{x}_0 = \bar{x} + \frac{\text{cov}(y, x)}{\text{var}(y)}(y_0 - \bar{y}).$$

o qual resulta da estimação da recta  $x = \gamma + \delta y + \epsilon$ ,

# Metodologia Bayesiana

## Metodologia clássica v.s. Metodologia Bayesiana

- Do ponto de vista clássico o estimador é uma variável aleatória com uma consequente distribuição de amostragem.
- Os intervalos de calibração (obtidos à custa da distribuição de amostragem) para o "verdadeiro valor"  $x_0$ , fixo e desconhecido, correspondente ao valor observado  $y_0$ , são intervalos aleatórios que contêm o verdadeiro valor com uma certa probabilidade.
- A filosofia por trás da metodologia bayesiana é totalmente diferente. O que se pretende é obter um intervalo fixo, função dos dados, de tal modo que a probabilidade de o valor desconhecido pertencer a esse intervalo seja uma quantidade pré-definida.

# Filosofia da Metodologia Bayesiana

- Do ponto de vista bayesiano **qualquer quantidade desconhecida** num sistema estatístico é tratada como uma **variável aleatória** sendo a incerteza associada, antes da experiência, medida por uma **distribuição de probabilidade**. Por exemplo aqui as quantidades desconhecidas são os parâmetros do modelo e o valor  $x_0$ .
- Esta distribuição é chamada de **distribuição *a priori*** por "existir" antes da realização da experiência.
- O resultado da experiência permite modificar a informação *a priori* sobre o desconhecido, obtendo-se o que se designa por **informação *a posteriori***.

# Aprendizagem Bayesiana

- A aprendizagem Bayesiana é o processo pela qual a informação *a priori* é modificada pela experiência para se tornar numa informação *a posteriori*.
- O teorema de Bayes é a "ferramenta" que permite fazer essa actualização da informação.

# Paradigma da Metodologia Bayesiana

- Brevemente, se  $p(\theta)$  quantificar a *informação a priori* e  $f(y|\theta)$  quantificar a *informação* sobre  $\theta$ , *obtida por amostragem*, então o teorema de Bayes diz que a *informação a posteriori* sobre  $\theta$  é quantificada por

$$p(\theta|y) \propto f(y|\theta)p(\theta)$$

onde a constante de proporcionalidade é obtida de modo a que  $p(\theta|y)$  seja uma distribuição de probabilidade (integre 1).

# Processo de Inferência na Metodologia Bayesiana

- Através do Teorema de Bayes obtém-se assim uma distribuição actualizada para  $\theta$  a qual se designa por *distribuição a posteriori*.
- Essa distribuição contém toda a informação necessária para fazer inferências sobre o parâmetro desconhecido.
- As inferências sobre  $\theta$  são assim baseadas na conjugação da informação *a priori* sobre  $\theta$  com a informação obtida sobre  $\theta$  através dos dados.

# Processo de Inferência na Metodologia Bayesiana

- Estimativa pontual de  $\theta$  pode ser obtida pela média ou mediana da distribuição a posteriori, sendo a medida da incerteza dada pelo desvio padrão de  $p(\theta|y)$ .
- Um intervalo de credibilidade com coeficiente, por exemplo de 95% de credibilidade é dado por  $\theta_L, \theta_U$  tal que

$$P(\theta \in [\theta_L, \theta_U]|y) = 0.95.$$

- Vantagem: interpretações mais directas e utilização de informação existente para além da experiência.



## Objectivo da calibração bayesiana

- Na experiência de calibração, temos um modelo para a distribuição de  $Y$  condicional a  $X$  e a um conjunto de parâmetros desconhecidos  $\theta$ .
- Do ponto de vista Bayesiano a este modelo temos que acrescentar um outro modelo para o que é desconhecido, ou seja para  $\theta$  e para  $x_0$ .
- A construção desse modelo terá que ser baseada em *informação a priori*, a qual dependerá do conhecimento intrínseco sobre o processo que irá gerar os dados.
- O objectivo final da calibração bayesiana é tentar chegar a uma descrição probabilística  $p(x|y, \mathcal{D})$  que exprima a plausibilidade dos vários valores de  $x$  para o(s) valor(e)s observado(s) de  $y$  e de  $\mathcal{D}$ .

## Formalização da calibração bayesiana

Para o problema de calibração onde se observa

$$\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}, y_0$$

- Modelo para os dados  $f(y|x, \theta)f(x|\psi)$ .
- Parâmetros desconhecidos  $(\theta, \psi)$  e  $x_0$  correspondente a  $y_0$  observado
- Modelo para os parâmetros - Informação a priori  $p(\theta, \psi)$  e  $f(x_0|\psi)$ .
- Informação por amostragem  

$$L(\theta, \psi, x_0|y_0, \mathcal{D}) = f(y_0|x_0, \theta) \prod_{i=1}^n f(y_i|x_i, \theta)f(x_i|\psi)$$
- Informação a posterior

$$p(\theta, \psi, x_0|y_0, \mathcal{D}) \propto L(\theta, \psi, x_0|y_0, \mathcal{D}) p(\theta, \psi)f(x_0|\psi).$$

## Distribuição de calibração

- O interesse reside em fazer inferências sobre  $x_0$ .
- Integrando  $p(\theta, \psi, x_0 | y_0, \mathcal{D})$  em relação a  $\theta$  e  $\psi$  obtém-se

$$p(x_0 | y_0, \mathcal{D})$$

que é chamada de **distribuição de calibração**.

- Com esta distribuição podemos obter
  - uma **estimativa pontual de  $x_0$** , usando por exemplo a **média ou a mediana da distribuição de calibração**.
  - uma medida da **incerteza associada** é dada pela **variância da distribuição de calibração**.
  - Um **intervalo de calibração** com probabilidade  $\gamma$  pode ser dado por  $(x_L, x_U)$  tal que

$$\int_{x_L}^{x_U} p(x_0 | y_0, \mathcal{D}) dx_0 = \gamma.$$

## Exemplo de Aplicação

## Exemplo de Aplicação: calibração de um auto-analisador (Aitchison & Dunsmore, 1975)

- Propõe-se instalar num hospital, um novo autoanalisador para determinação da concentração de uma certa enzima em amostras de plasma.
- A concentração da enzima pode ser determinada com precisão através de métodos demorados e dispendiosos enquanto o método do auto-analisador é rápido e barato.
- Sabe-se através de experiência passada considerável que as amostras apresentadas para análise têm concentrações da enzima (meq/l) com uma média de 4.6 e um desvio padrão 0.8.
- Para avaliar a eficácia do auto-analisador usaram-se 9 amostras de plasma, as quais foram divididas em quatro partes, sendo uma parte enviada para análise através do método laboratorial e as outras três para análise com o auto-analisador.
- Os dados obtidos estão na tabela que se segue

## Exemplo de Aplicação: dados de calibração de um auto-analisador

Número da amostra de plasma	determinação laboratorial (meq/l)	determinações do auto-analisador		
1	3.0	2.3	2.4	2.5
2	3.4	2.6	2.8	2.8
3	3.8	3.0	3.0	3.1
4	4.2	3.2	3.3	3.4
5	4.6	3.7	3.7	3.7
6	5.0	3.9	4.0	4.1
7	5.4	4.2	4.2	4.3
8	5.8	4.6	4.7	4.8
9	6.2	4.9	5.0	5.2

# Gráfico dados de calibração de um auto-analisador

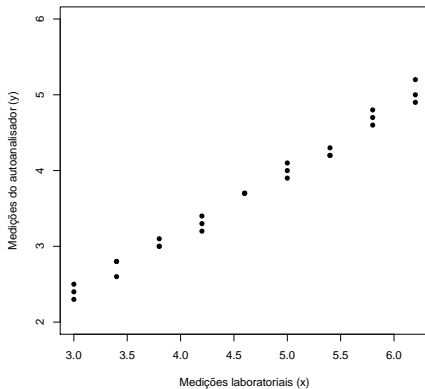


Figure 1: Diagrama de pontos

## Exemplo de Aplicação: calibração de um auto-analisador

Questões postas:

- Será razoável admitir que de futuro seja apenas necessária uma amostra a analisar pelo auto-analisador para ter uma estimativa fiável da concentração da enzima?
- Se para uma nova amostra de plasma o auto-analisador der uma concentração de 3.8 meq/l, o que se pode dizer sobre a concentração da enzima?



# Metodologia Bayesiana Aplicada à calibração

## Exemplo de aplicação

No exemplo podemos considerar

- $f(y|x, \theta) = N(\alpha + \beta x, \sigma^2)$
- Como há informação precisa sobre o processo laboratorial  $f(x|\psi) = f(x) = N(4.6, 0.64)$
- Assim  $p(x_0) = f(x_0|\psi) = f(x_0) = N(4.6, 0.64)$
- A verosimilhança será  $L(\theta|\mathcal{D}) = \prod_{i=1}^n f(y_i|x_i, \alpha, \beta, \sigma^2)$
- A distribuição *a priori*

$$\begin{aligned} p(\alpha, \beta, \sigma^2, x_0) &= p(\alpha, \beta|\sigma^2)p(\sigma^2)p(x_0) \\ &= N_2(\mu_{\alpha,\beta}, \Sigma) \text{InvGa}(g, h) N(4.6, 0.64) \end{aligned}$$

com  $\mu_{\alpha,\beta}$ ,  $\Sigma$  e  $a, b$  conhecidos (informação *a priori* de peritos ou não informativa).

## Exemplo de aplicação

- A distribuição *a posteriori*

$$p(\alpha, \beta, \sigma^2, x_0 | \mathcal{D})$$

será proporcional ao produto da verosimilhança pela distribuição *a priori*

- A distribuição de calibração será

$$p(x_0 | \mathcal{D}) = \int p(\alpha, \beta, \sigma^2, x_0 | \mathcal{D}) d\alpha, d\beta, d\sigma^2$$

Esta distribuição não tem uma forma explícita.

- Podemos no entanto obtê-la, assim como o seu valor esperado, variância e quantis, usando métodos numéricos.

# Exemplo de aplicação: distribuição de calibração

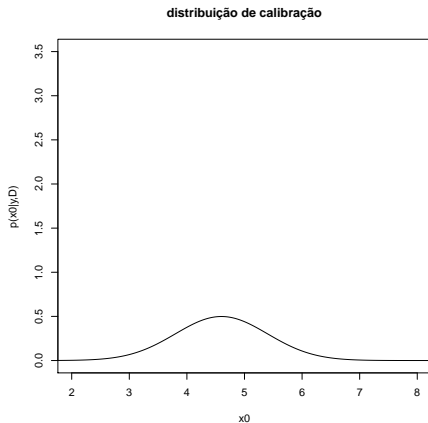


Figure 2: Distribuição de calibração *a priori*

# Exemplo de aplicação: distribuição de calibração

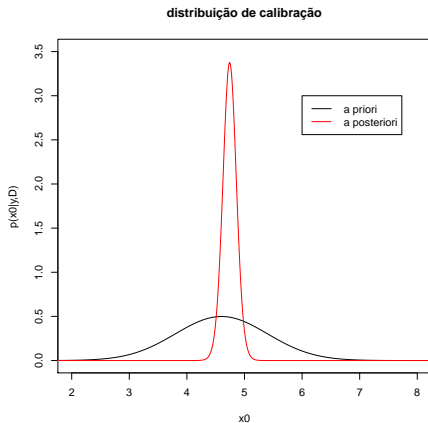


Figure 3: Distribuição de calibração *a posteriori*

# Exemplo de aplicação: distribuição de calibração

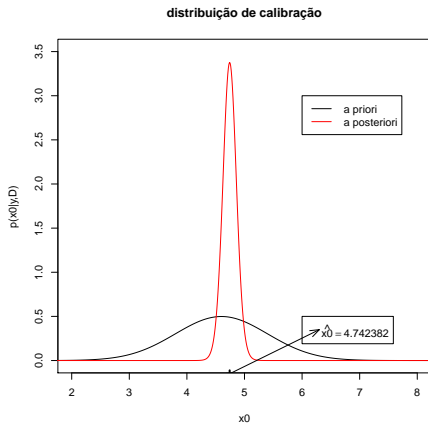


Figure 4: calibração pontual

# Exemplo de aplicação: distribuição de calibração

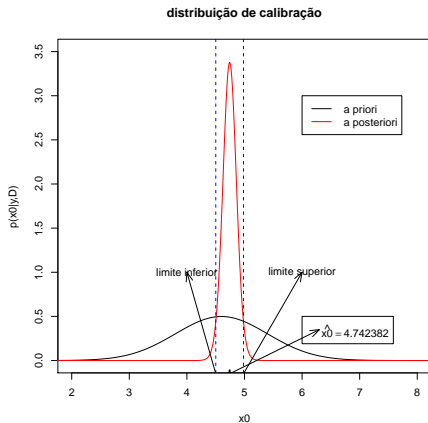


Figure 5: Intervalo de calibração

# Exemplo de aplicação: distribuição de calibração

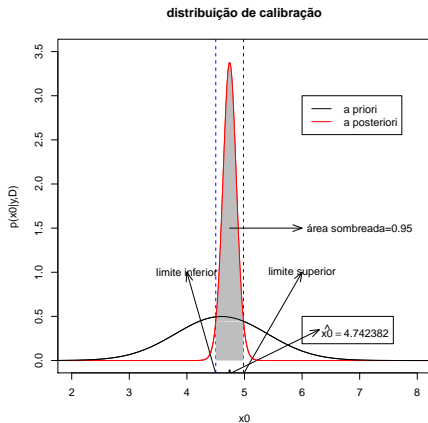


Figure 6: Interpretação do Intervalo de calibração



## Discussão

## Discussão

Comparação das estimativas de  $x_0$  e dos intervalos de calibração

- Regressão directa

$\hat{x}_0 = 4.74562$ , (4.502053, 4.989187); amplitude do intervalo 0.487134

- Regressão inversa

$\hat{x}_0 = 4.743936$ , (4.497252, 4.99062) amplitude do intervalo 0.493368

- Metodologia Bayesiana

$\hat{x}_0 = 4.742382$ , (4.501547, 4.982826) amplitude do intervalo 0.481279

Observamos assim que as estimativas de  $x_0$  são muito próximas mas o intervalo com menor amplitude é obtido com a metodologia bayesiana. A interpretação deste intervalo é também diferente. Aqui podemos dizer que a probabilidade de  $x_0$  se encontrar no intervalo (4.501547, 4.982826) é de 0.95. Não é esta a interpretação dos intervalos clássicos.

## Referências

## Referências

- Aitchison, J. and Dunsmore, I. R. (1975) *Statistical Prediction Analysis*, Cambridge University Press.
- Cox, M.G., Forbes, A.B., Harris, P.M., Smith, I.M. (2009) Measurement uncertainty evaluation associated with calibration functions. *XIX IMEKO World Congress, Fundamental and Applied Metrology*, 2346-2351
- Hernandez, N, Biscay, R.J., Talavera, I (2012) A non-Bayesian predictive approach for statistical calibration. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, **82**, 529-545
- Osborne, C. (1991) Statistical Calibration: A Review. *International Statistical Review*, **59**, 309-336