Nuevo método para estimar la incertidumbre que afecta a los resultados de modelos matemáticos

Tarifa, Enrique E.[1, 2]; Salcedo, Gustavo A. [2, 3]; Martínez, Sergio L.[1]; Coronel, Eve L.[3]

(3) Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy.
eetarifa@fi.unju.edu.ar; smartinez@fi.unju.edu.ar
(4) CONICET
(5) Facultad de Agronomía y Agroindustrias, Universidad Nacional de Santiago del Estero.
gusalc2.92@gmail.com; evecoronel@gmail.com

RESUMEN

El resultado de todo cálculo tiene asociada una incertidumbre que es función de la incertidumbre de los datos y de las operaciones matemáticas realizadas. La importancia de estimar la incertidumbre de un resultado motivó el desarrollo de varios métodos. Uno de ellos fue publicado por la Organización Internacional para la Estandarización, junto a seis organizaciones vinculadas a la medición y estandarización. Este método consiste en una solución analítica cuya complejidad y rango de validez dependen del cumplimiento de ciertas hipótesis. En el presente trabajo, se adoptan algunos conceptos de dicho método, y se agrega la propagación de la incertidumbre empleando la simulación de Monte Carlo. El método original y el propuesto se aplicaron a un caso de estudio, y se observó que ambos concuerdan en las estimaciones realizadas. Sin embargo, el método propuesto en el presente trabajo no requiere el cumplimiento de ninguna hipótesis, lo cual expande su rango de validez.

ABSTRACT

The result of any calculation has an associated uncertainty that is a function of the uncertainty of the data and of the mathematical operations performed. The importance of estimating the uncertainty of a result motivated the development of several methods. One of them was published by the International Organization for Standardization, together with six organizations linked to measurement and standardization. This method consists of an analytical solution whose complexity and range of validity depend on the fulfillment of certain hypotheses. In the present work, some concepts of that method are adopted, and the propagation of uncertainty using Monte Carlo simulation is added. The original method and the proposed one were applied to a case study, and it was observed that both agree in the estimates yielded. However, the method proposed in the present work does not require the fulfillment of any hypothesis, which expands its range of validity.

Palabras claves: propagación de incertidumbre – simulación de Monte Carlo – GUM

Keywords: uncertainty propagation – Monte Carlo simulation – GUM

1. INTRODUCCIÓN

Toda medida experimental involucra un error. Este error afecta inevitablemente a los resultados de los cálculos que se realicen a partir de ella. La estimación del efecto que tiene el error de los datos sobre los resultados de los cálculos es un problema que se presenta en varios campos de la ciencia, tecnología e ingeniería. Por este motivo, en cada campo se generalizó el empleo de alguna solución particular: propagación de errores, propagación de varianza, propagación de cifras significativas, entre otras (Babu, 2004).

Uno de los métodos usados para realizar la propagación de errores es la Simulación de Monte Carlo (Metropolis, 1987; Metropolis & Ulam, 1949; Toggerson & Philbin, 2020). Con este método, primero, se deben identificar las distribuciones probabilísticas que gobiernan los datos. Luego, se emplean generadores de variables aleatorias para generar valores que obedezcan a dichas distribuciones. Estos valores son usados como datos en los cálculos que se realizan para obtener los posibles resultados. Finalmente, se analiza la distribución de frecuencia de los resultados para estimar un intervalo de confianza. El problema con este método es que no existía un consenso para identificar la incertidumbre de los datos.

Como, generalmente, los datos se obtienen de mediciones, el problema radicaba en estimar la incertidumbre de las mismas. Antes de 1993, no existía un procedimiento estándar internacional para estimar y reportar la incertidumbre en mediciones. Para superar los inconvenientes causados por esa situación, la Organización Internacional para la Estandarización, junto a seis organizaciones vinculadas a la medición y estandarización, publicó la *Guía para la expresión de la incertidumbre en la medición* (International Organization for Standardization, 1993), generalmente referida como GUM por sus siglas en inglés (*Guide to the expression of uncertainty in measurement*).

El procedimiento recomendado por la GUM permite estimar la incertidumbre del resultado de un cálculo a partir de la incertidumbre conocida de los datos. La incertidumbre de los datos se clasifica en dos tipos: tipo A y tipo B. Para el primer tipo, la incertidumbre se estima mediante cálculos estadísticos aplicados a una muestra. En cambio, para el segundo tipo, la incertidumbre se estima aplicando la experiencia y el criterio profesional; por lo tanto, esta estimación es subjetiva (Ray, 2012; Taylor & Kuyatt, 1994). De acuerdo a la GUM, la incertidumbre tipo A se obtiene de una función de densidad de probabilidad derivada de la distribución de frecuencias observadas; mientras que la incertidumbre tipo B se obtiene de una función de densidad de probabilidad que se asume basada en la confianza que se tiene en que un evento dado ocurrirá, por lo cual es subjetiva. Los dos enfoques usan diferentes interpretaciones de la probabilidad: el primero emplea la interpretación frecuentista; el segundo, la bayesiana (Molina, 2020).

Los conceptos y cálculos involucrados en el procedimiento sugerido por la GUM tienen cierta complejidad. Por este motivo, existen varias publicaciones que explican cómo debe aplicarse este procedimiento (Bell, 2001; Gregory et al., 2005; Ray, 2012; Taylor & Kuyatt, 1994). Otros inconvenientes del método en cuestión surgen de las hipótesis adoptadas para poder obtener una solución analítica práctica; cuando esas hipótesis no se cumplen, el procedimiento modifica los cálculos haciéndolos más complejos y menos prácticos.

Para superar estos inconvenientes del método sugerido por la GUM, en el presente trabajo se propone un nuevo método. El método propuesto combina la estimación de las incertidumbres tipo A y B del método recomendado por la GUM con la simulación de Monte Carlo para realizar la propagación de tales incertidumbres. Este nuevo método resuelve en forma numérica el problema, por lo que no requiere el cumplimiento de hipótesis simplificadoras que restrinjan el rango de aplicación.

2. METODOLOGÍA

Como se planteó previamente, en el método propuesto en este trabajo, se combina el procedimiento planteado por la GUM con la simulación de Monte Carlo. De la GUM, se adopta la forma de estimar las incertidumbres tipo A y B. Luego, se emplea la simulación de Monte Carlo para propagar numéricamente esas incertidumbres para estimar la incertidumbre del resultado del cálculo. Por este motivo, a continuación, se describen el procedimiento recomendado por la GUM, la simulación de Monte Carlo y la combinación que se propone en el presente trabajo.

2.1 *Procedimiento GUM*

El procedimiento indicado por la GUM consiste en los siguientes pasos (Gregory et al., 2005; International Organization for Standardization, 1993; Taylor & Kuyatt, 1994):

1. Definir el modelo que permita el cálculo de la variable dependiente Y (resultado) en función de las m variables independientes X, denominadas componentes de incertidumbre:

$$Y = f\left(X_1, X_2, \ldots, X_m\right) \tag{1}$$

2. Para cada variable independiente X_j, con j de 1 a m:
   a. Estimar la incertidumbre tipo A. Usando las n_j mediciones correspondientes, calcular el promedio $\overline{X}_j$, la desviación estándar u_j y el grado de libertad ν_j (Ray, 2012):

$$\overline{X}_j = \frac{1}{n_j}\sum_{i=1}^{n_j} x_{i,j} \tag{2}$$

$$S^2\left(X_j\right) = \frac{1}{n_j - 1}\sum_{i=1}^{n_j}\left(x_{i,j} - \overline{X}_j\right)^2 \tag{3}$$

$$u_j = \sqrt{\frac{S^2\left(X_j\right)}{n_j}} \tag{4}$$

$$\nu_j = n_j - 1 \tag{5}$$

b. Estimar la incertidumbre tipo B. Esto se hace suponiendo la distribución probabilística que gobierna a la componente de incertidumbre en analizada. Las distribuciones más empleadas son la normal y la uniforme o rectangular. La distribución normal se emplea cuando se tiene cierta confianza en los datos, mientras que la uniforme se reserva para los casos en se tiene poca confianza en los datos. Primero, se debe estimar el valor *a*, tal que el error del dato pertenezca al intervalo [-*a*,*a*] con un cierto nivel de confianza. Considerando dicho valor y la distribución asumida, se obtendrá el correspondiente u_j. De acuerdo al nivel de confianza que se tenga del dato, se estima un valor de ν_j siguiendo las indicaciones de Gregory et al. (2005).

c. Calcular los coeficientes de sensibilidad c_j empleando derivadas parciales analíticas o numéricas:

$$c_j = \frac{\partial Y}{\partial X_j} \approx \frac{Y\left(\overline{X}_j + \Delta X_j\right) - Y\left(\overline{X}_j - \Delta X_j\right)}{2\,\Delta X_j} \tag{6}$$

donde se adopta $\Delta X_j = u_j$ en el presente trabajo.

3. Calcular el valor promedio de *Y*:

$$\overline{Y} = f\left(\overline{X}_1, \overline{X}_2, \ldots, \overline{X}_m\right) \tag{7}$$

4. Calcular la desviación estándar de *Y* suponiendo un modelo lineal y que no existe correlación entre las incertidumbres:

$$u_{\mathrm{Y}} = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}\left(c_j\, u_j\right)^2} \tag{8}$$

5. Calcular el grado de libertad del resultado ν_{Y}:

$$\nu_{\mathrm{Y}} = \frac{u_{\mathrm{Y}}^4}{\sum_{j=1}^{m}\frac{\left(c_j\, u_j\right)^4}{\nu_j}} \tag{9}$$

6. Calcular la incertidumbre expandida U_{Y}:

$$U_{\mathrm{Y}} = k\, u_{\mathrm{Y}} \tag{10}$$

donde el factor de cobertura *k* se calcula con la distribución de Student. Por ejemplo, para un nivel de confianza del 95 % del intervalo $\left[\overline{Y} - U_{\mathrm{Y}}, \overline{Y} + U_{\mathrm{Y}}\right]$ y $\nu_{\mathrm{Y}} = 5$, *k* adopta el valor 2.57.

7. Redondear U_{Y} a una cifra significativa si el primer dígito significativo es igual o mayor que cinco, sino redondear a dos cifras significativas. Redondear en exceso, salvo que la primera cifra retirada sea igual o menor de 2.

8. Redondear $\overline{Y}$ para que la última cifra significativa sea del orden de la primera cifra significativa de U_{Y}. Si la primera cifra retirada es cinco, redondear la cifra que queda al dígito par más cercano.

2.2 *Simulación de Monte Carlo*

El procedimiento básico recomendado por la GUM tiene algunas limitaciones debido a las hipótesis adoptadas: a) las incertidumbres de las componentes no están correlacionadas, b) existe una relación lineal entre las incertidumbres de las componentes con la incertidumbre del resultado (Gregory et al., 2005). Si estas hipótesis no se cumplen, el procedimiento descripto anteriormente se modifica incorporando cálculos más complejos. A todo esto, se agrega la necesidad de tener que calcular siempre los coeficientes de sensibilidad c_j para cada componente de incertidumbre.

En el método que se propone en el presente trabajo, las incertidumbres también se clasifican en tipo A y B para obtener la desviación estándar u_j y el grado de libertad ν_j de cada componente de incertidumbre X_j. Luego, estos valores son utilizados para realizar una simulación de Monte Carlo que permite obtener la distribución de frecuencias del resultado *Y*. Finalmente, a partir de esta distribución, se determina el intervalo de confianza del resultado, $\left[\overline{Y} - U_{\mathrm{Y}}, \overline{Y} + U_{\mathrm{Y}}\right]$. Con este procedimiento, se superan todas las limitaciones del procedimiento recomendado por la GUM: a) se pueden considerar las correlaciones que existan entre las incertidumbres de los datos sin volver más complejo los cálculos, b) se puede trabajar con un modelo no lineal sin modificar el procedimiento, c) no emplea coeficientes de sensibilidad.

Básicamente, la simulación de Monte Carlo ejecuta el siguiente procedimiento:

1. Generar valores aleatorios para las variables X_j utilizando los generadores correspondientes a las distribuciones probabilísticas que las gobiernan.
2. Empleando el modelo, calcular el valor de Y correspondiente a los valores de X_j generados.
3. Guardar el valor de Y en una tabla.
4. Si no se alcanzó la cantidad de iteraciones deseadas, regresar al paso 1.
5. A partir de los valores de Y guardados en la tabla de resultados, determinar el intervalo de confianza del resultado.

El mayor inconveniente que tiene el procedimiento propuesto es el gran número de cálculos que involucra. Sin embargo, esto se resuelve utilizando algún software específico para simulación de Monte Carlo. Uno de ellos fue utilizado en este trabajo, se trata del complemento gratuito para Excel denominado Argo (Argo, 2021).

En cuanto a las distribuciones probabilísticas empleadas para modelar las incertidumbres, en este trabajo se emplearon distribuciones de Student con grado de libertad ν. De esta manera, una vez generado un valor t con esta distribución para una componente de incertidumbre X_j dada, el valor correspondiente de esa componente se calcula con la siguiente ecuación:

$$X_j = \overline{X_j} + u_j\, t \tag{11}$$

3 RESULTADOS

3.1 *Caso de estudio*

Para comparar los dos métodos en cuestión, se eligió un caso de estudio: la estimación de la densidad ρ de una solución de NaCl al 2 % utilizando la masa m y el volumen V como variables independientes a medir; por lo tanto, el modelo está dado por la ec. (12). Este caso de estudio fue presentado por Delgado (2020). Con el fin de no extender la explicación más allá de lo estrictamente necesario, solo se utilizó un subconjunto de datos de los informados en el citado trabajo.

$$\rho = \frac{m}{V} \tag{12}$$

El instrumental empleado consistió en un picnómetro de 10 mL y una balanza analítica, cuyo display presenta el resultado en gramos, con una precisión de un entero y cuatro decimales. El certificado de calibración de la balanza informa una incertidumbre expandida de 0.00002 g, con un factor de cobertura $k = 2$ para el 95 % de confianza. El certificado de calibración del picnómetro informa una incertidumbre expandida de 0.00013 mL, con un factor de cobertura $k = 2$ para el 95 % de confianza.

En este ejemplo, la variable dependiente es ρ, mientras que las componentes de incertidumbre son todas aquellas que afectan a m y V; por lo tanto, existen dos fuentes de incertidumbre: el pesaje y la medición del volumen. Por una parte, el pesaje se ve afectado por una incertidumbre X_1, tipo A, debida a la repetibilidad de las mediciones; otra incertidumbre X_2, tipo B, debida a la calibración de la balanza; y otra incertidumbre X_3, tipo B, debida a la resolución del display de la balanza. Por otra parte, el volumen solo es afectado por una incertidumbre X_4, tipo B, debida a la calibración del picnómetro.

Por lo planteado, el modelo a emplear para el cálculo de la densidad considerando todas las componentes de incertidumbre es el siguiente:

$$m = \overline{m} + X_1 + X_2 + X_3 \tag{13}$$

$$V = \overline{V} + X_4 \tag{14}$$

$$\forall j, \overline{X_j} = 0 \tag{15}$$

$$Y = \rho = \frac{m}{V} \tag{16}$$

3.2 *Aplicación de la GUM*

Delgado (2020) promedió tres mediciones de m, tabla 1; por lo tanto, la correspondiente desviación estándar u_1, tipo A, es $0.0003\ \text{g}/\sqrt{3} = 0.00017\ \text{g}$. Por otra parte, la incertidumbre u_2 debida a la calibración de la balanza, tipo B, es igual a la incertidumbre expandida (del certificado) dividida por k, es decir: $0.00002\ \text{g}/2 = 0.00001\ \text{g}$. Por último, la incertidumbre u_3 debida a la resolución del display de la balanza, tipo B, es función del número más pequeño que puede mostrar el equipo (0.0001): $\left(0.0001\ \mathrm{g}/2\right)/\sqrt{3} = 0.000029\ \mathrm{g}$ (asumiendo una distribución rectangular para la incertidumbre entre -0.00005 y 0.00005 con un nivel de confianza del 100 %).

Tabla 1: Medición de la masa de una solución de NaCl al 2 % (Delgado, 2020)

Réplica	Peso del picnómetro vacío (g)	Peso del picnómetro lleno (g)	Masa de la solución (g)
1	30.5432	40.5534	10.0102
2	30.5431	40.5538	10.0107
3	30.5433	40.5536	10.0103
		Promedio (g)	10.0104
		Desviación estándar (g)	0.0003

En cuanto al picnómetro, a partir de la información brindada en el certificado de calibración, se estima la incertidumbre u_4, tipo B, como $0.00013\ \mathrm{mL}/2 = 0.000065\ \mathrm{mL}$.

La tabla 2 presenta todas las incertidumbres estimadas de la forma que se explicó anteriormente. También, esa tabla presenta los correspondientes grados de libertad. Para las incertidumbres tipo B, los grados de libertad se estimaron de acuerdo a lo indicado por Gregory et al. (2005), suponiendo que son estimaciones razonables. Los coeficientes de sensibilidad se obtuvieron de las correspondientes derivadas parciales del modelo, y se evaluaron con los valores medios $\overline{m}$ y $\overline{V}$.

Tabla 2: Tabla de análisis de incertidumbre

j	Componente, X	Tipo	Distribución original	u	ν	c
1	m repetibilidad	A	Normal, u = 0.00017 g	0.00017 g	2	0.1
2	m calibración	B	Normal, u = 0.00001 g	0.00001 g	8	0.1
3	m display	B	Triangular, ±0.00005 g	0.000029 g	8	0.1
4	V calibración	B	Normal, u = 0.000065 mL	0.000065 mL	8	-0.1

El promedio de la densidad, obtenido con la ec. (7), es 1.00104 g/mL. La incertidumbre asociada a este resultado se calculó a partir de los datos de la tabla 2, siguiendo el procedimiento indicado por la GUM, lo que produjo $u_Y = 1.84594\times10^{-5}$ g/mL. Para un nivel de confianza del 95 %, con la distribución Student se obtuvo $k = 4.30$; por lo tanto, la incertidumbre expandida es $U_Y = 8\times10^{-5}$ g/mL. De esta manera, el intervalo de confianza del 95 % para la densidad es $1.00104\pm8\times10^{-5}$ g/mL.

3.3 *Aplicación de la simulación de Monte Carlo*

Para la aplicación del método propuesto en este trabajo, se requiere conocer las distribuciones de probabilidad que gobiernan a las incertidumbres de los datos. Por la forma en que se estimaron las incertidumbres tipo A y B, dichas distribuciones son del tipo Student. Las desviaciones estándar y los grados de libertad que se utilizaron para esas distribuciones son los reportados en la tabla 2.

La densidad se estimó a partir de la distribución de frecuencias de la variable aleatoria Y definida por la ec. (16). En esta ecuación, los valores de las incertidumbres son generados con la distribución de Student, ec. (11).

La Fig. 1 muestra el efecto de la cantidad de iteraciones realizadas en la simulación sobre la incertidumbre expandida del resultado. Esta incertidumbre se estabiliza para valores de iteraciones mayores de 700. En base a esta observación, se realizó una simulación con 1000 iteraciones para generar igual cantidad de valores de Y. Luego, se analizaron esos valores para obtener el intervalo de confianza del 95 %. Este intervalo de confianza se puede obtener con las herramientas que ofrece Argo, o por un posterior procesamiento de los resultados para determinar el ancho del intervalo, con centro en el valor promedio del resultado, que contiene el 95 % de los resultados de las simulaciones realizadas. El intervalo obtenido de esa manera concuerda con el obtenido aplicando el procedimiento recomendado por la GUM. Esta concordancia prueba que el método propuesto, que es numérico, puede reproducir los resultados del método propuesto por la GUM, que es analítico. Sin embargo, al no requerir el cumplimiento de ninguna hipótesis, el rango de aplicación del nuevo método es mayor.

En el caso de estudio analizado, se tradujeron las distribuciones originales que gobiernan las incertidumbres (tabla 2) a distribuciones Student para poder comparar el intervalo de confianza obtenido con el método propuesto con el obtenido con el método recomendado por la GUM. Sin embargo, una ventaja adicional del método propuesto en este trabajo es que el nuevo método puede emplear las distribuciones originales que gobiernan a las incertidumbres para, de ese modo, determinar con mayor precisión el intervalo de confianza del resultado del cálculo estudiado.

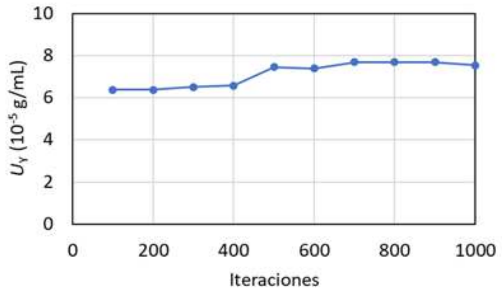

Figura 1: Efecto de las iteraciones de la simulación sobre la incertidumbre expandida del resultado.

4 CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un nuevo método para estimar la incertidumbre que afecta al resultado del cálculo de una ecuación o de un modelo matemático. El método propuesto emplea las recomendaciones de la GUM para estimar las incertidumbres tipo A y B. Luego, utiliza esta información en una simulación de Monte Carlo para obtener el intervalo de confianza del resultado del cálculo realizado. El método presentado no requiere la linealidad del modelo ni la independencia de las componentes de incertidumbre. Tampoco requiere el cálculo de los coeficientes de sensibilidad. Además, puede trabajar con las distribuciones de probabilidad originales que gobiernan a las incertidumbres, sin necesidad de traducirlas a distribuciones Student. La dificultad más relevante del método propuesto es la gran cantidad de cálculos que involucra, pero esta dificultad se supera empleando un software destinado a la simulación de Monte Carlo.

En el estudio realizado, se observó una total concordancia entre los resultados obtenidos por el nuevo método y el recomendado por la GUM. Sin embargo, el método propuesto tiene un mayor rango de aplicación por no requerir el cumplimiento de hipótesis lo limiten y, al poder emplear las distribuciones originales que gobiernan a las incertidumbres involucradas, tiene el potencial para estimar con mayor precisión el intervalo de confianza del resultado del cálculo.

5 REFERENCIAS

Argo, *Argo—Simulation*. https://boozallen.github.io/argo/, 21/4/2021.

Babu B. V., *Process plant simulation*. Oxford University Press, 2004.

Bell S., A beginner's guide to uncertainty of measurement. *Measurement Good Practice Guide*, 11(2), 1-33, 2001.

Delgado O., Cómo evaluar la incertidumbre de medición sin necesidad de ser un experto en matemáticas. *SGC-Lab*. https://sgc-lab.com/guia-para-estimar-la-incertidumbre-de-la-medicion-hecha-para-personas-normales/, 20/01/2020.

Gregory K., G. Bibbo, J. E. Pattison. A standard approach to measurement uncertainties for scientists and engineers in medicine. *Australasian Physics & Engineering Sciences in Medicine*, 28(2), 131–139. https://doi.org/10.1007/BF03178705, 2005.

International Organization for Standardization. *Guide to the expression of uncertainty in measurement* (ISO/IEC GUIDE 98:1993; p. 105). International Organization for Standardization. https://www.iso.org/standard/45315.html, 1993.

Metropolis N., The beginning of the Monte Carlo method. *Los Alamos Science*, *Special Issue*, 125–130, 1987.

Metropolis N., S. Ulam. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247), 335–341, https://doi.org/10.1080/01621459.1949.10483310, 1949.

Molina M., ¿Rioja o Ribera? Estadística frecuentista vs bayesiana. *Revista Electrónica AnestesiaR*, 12(10). https://doi.org/10.30445/rear.v12i10.892, 2020.

Ray S., Error propagation and uncertainty evaluation for automatic control-A neglected part of engineering education. *Procedia Technology*, 4, 629–635, 2012.

Taylor B. N., C. E. Kuyatt. *Guidelines for evaluating and expressing the uncertainty of nist measurement results* (NIST Technical Note No. 1297; p. 20). National Institute of Standards and Technology, 1994.

Toggerson B., A. Philbin, *Monte Carlo Error Propagation*, http://openbooks.library.umass.edu/p132-lab-manual/chapter/monte-carlo-error-propagation/, 2020.