Teoria prawdopodobieństwa warunkowego w metrologii

Współczesna metrologia w dziedzinie opracowania wyniku pomiaru i teorii wielkości mierzonej sięga do korzeni zagadnień związanych z podstawami probabilistyki. Nawiązuje do historycznych rozwiązań wywodzących się z koncepcji prawdopodobieństwa warunkowego sformułowanego przez brytyjskiego matematyka i duchownego prezbiteriańskiego Thomasa Bayesa (1702 – 1761). Teoria prawdopodobieństwa warunkowego bowiem pozwala na łączenie informacji o wielkości mierzonej pochodzącej spoza pomiaru z danymi pomiarowymi. Wiedza o wielkości mierzonej nigdy nie jest kompletna, ale można ją jedynie przybliżyć łącząc ze sobą informacje różnej natury. Informacje te przedstawiane są w postaci funkcji gęstości prawdopodobieństwa. Funkcja ta tworzona jest na podstawie dostępnej informacji (*state of knowledge*) o wielkości mierzonej, która nigdy nie jest pełna i kompletna. Dostępna wiedza o niej jedynie charakteryzuje stopień wiary (*degree of belief*), że wielkość można wyrazić poprzez rozkład możliwych dla niej wartości. Przyjmuje się, że zbiór tych wartości opisuje wielkość mierzoną, wyrażaną poprzez jego parametry probabilistyczne w postaci wartości oczekiwanej, odchylenia standardowego i przedziału rozszerzenia. Wartość oczekiwana jest miarą estymaty wielkości, a odchylenie standardowe miarą niepewności standardowej.

Przyjmuje się, że wiedzę o wielkości mierzonej można czerpać bezpośrednio z pomiaru, na podstawie danych pomiarowych oraz spoza pomiaru, na podstawie informacji o procesie pomiarowym. Na podstawie analizy powyższej wiedzy powstają dwa zbiory informacji. Zbiór określony na podstawie wiedzy o samym pomiarze stanowi informację pierwotną (*prior information*) o wielkości mierzonej. Probabilistyczne parametry tego zbioru wyznaczane są na ogół przed wykonaniem pomiaru. W trakcie pomiaru natomiast pozyskiwane są dane, które służą do określenia drugiego zbioru, którego parametry określane są metodą statystyczną. Dane te aktualizują zbiór pierwotny tworząc nowy zbór wynikowy (*posterior information*). Zbiór ten także charakteryzowany jest parametrami probabilistycznymi.

Wyznaczenie zbioru wynikowego opiera się na twierdzeniu Bayesa, które mówi, że prawdopodobieństwo tego zbioru jest iloczynem prawdopodobieństw zbioru pierwotnego i zbioru danych. Zasadę powyższą można zapisać w ogólnej postaci

$$p\left(Y|AB\right) = C \cdot p\left(Y|A\right) \cdot p\left(Y|B\right)$$

gdzie jest Y oznacza wielkość mierzoną, A oznacza zbiór danych pomiarowych, B oznacza zbiór informacji o wielkości mierzonej, wynikającą z wiedzy o procesie pomiarowym, a C jest stałą proporcjonalności. Celem działania metrologicznego jest wyznaczenie zbioru $Y \mid AB$. Zapis powyższy oznacza, że informacja o wielkości mierzonej Y jest warunkowana danymi pomiarowymi A i wiedzą wcześniejszą o pomiarze B. Równanie powyższe można zapisać w postaci funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla wielkości mierzonej

$$g\left(\eta|\mu,\sigma\right) = K \cdot g\left(\eta\right) \cdot l\left(\eta;\mu,\sigma\right)$$

gdzie K oznacza stałą proporcjonalności, $g(\eta)$ funkcję gęstości prawdopodobieństwa danych pomiarowych, $l(\eta;\, \mu,\, \sigma)$ funkcję wiarygodności dotyczącą wiedzy o pomiarze na podstawie wcześniejszej analizy procesu pomiarowego. Funkcja ta ma określone parametry wynikające z posiadanej wiedzy. Na jej podstawie przyjmuje się wartość oczekiwaną μ i odchylenie standardowe σ. Zakłada się również dla tej funkcji rozkład normalny w postaci

$$l(\eta;\mu,\sigma)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma}\exp\left(-\frac{(\eta-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Dla danych pomiarowych oba parametry estymuje się odpowiednimi statystykami na podstawie serii obserwacji. Estymatą wartości oczekiwanej jest wartość średnia, a estymatą odchylenia standardowego statystyka bayesianowska postaci

$$s(\bar{y})_{\text{Bayes}}=\sqrt{\frac{n-1}{n-3}}s(\bar{y})$$

gdzie $s(\bar{y})$ to odchylenie standardowe eksperymentalne średniej, n to liczba obserwacji. Należy pamiętać, że zależność powyższa ma sens matematyczny, gdy $n > 3$. Zastosowanie powyższej statystyki w miejsce odchylenia standardowego eksperymentalnego średniej spowodowane jest przyjęciem założenia o normalności rozkładu dla danych pomiarowych. Jak wiadomo z podstaw statystyki matematycznej, zgodnie z wnioskowaniem Williama Gosseta (1876 – 1937), rozkładem dla średniej z ograniczonej liczebnie serii obserwacji jest rozkład zmiennej t zwany rozkładem Studenta (ściśle jest to rozkład ilorazu różnicy tej średniej i wartości oczekiwanej populacji danych, o rozkładzie normalnym, w odniesieniu do odchylenia standardowego eksperymentalnego średniej). Należy dodać, że mnożnik we wzorze powyżej jest równy odchyleniu standardowemu tego rozkładu o liczbie stopni swobody $\nu = n - 1$.

Przyjęcie założenia o normalności rozkładu ma również dodatkowy aspekt, a mianowicie ten że parametry rozkładu dla wielkości mierzonej są stałymi, a nie zmiennymi losowymi jak w podejściu statystycznym (gdy wielkość mierzoną ocenia się tylko na podstawie serii obserwacji). Funkcję gęstości rozkładu związanego z danymi pomiarowymi można zapisać w postaci

$$g(\eta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\;s(\bar{y})_{\text{Bayes}}}\exp\left(-\frac{(\eta-\bar{y})^2}{2s(\bar{y})^2_{\text{Bayes}}}\right)$$

Aby wyznaczyć parametry rozkładu wynikowego dla wielkości mierzonej, powstałego w oparciu o twierdzenie Bayesa, przyjmijmy dla wygody następujące oznaczenia: $y_1 = \mu$; $u_1 = \sigma$ oraz $y_2 = \bar{y}$; $u_2 = s(\,\bar{y}\,)_{\text{Bayes}}$. Uzyskujemy proporcjonalność

$$g(\eta|y_1,u_1)\propto\exp\left[-\frac{(\eta-y_1)^2}{2u_1}-\frac{(\eta-y_2)^2}{2u_2}\right]\propto\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{u_1^2}+\frac{1}{u_2^2}\right)\eta^2+\left(\frac{y_1}{u_1^2}+\frac{y_2}{u_2^2}\right)\eta\right]$$

Ponieważ wzajemne przemnażanie funkcji Gaussa daje w wyniku również funkcję Gaussa to istnieje taka jej postać, że

$$g(\eta|y_1,u_1) \propto \exp\left[-\frac{(\eta-y)^2}{2u}\right] \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{u^2}\right)\eta^2 + \left(\frac{y}{u^2}\right)\eta\right]$$

Prowadzi to do wniosku, iż parametry funkcji wynikowej (*posterior function*) opisującej wielkość mierzoną powiązane są zależnościami

$$\frac{y}{u^2} = \frac{y_1}{u_1^2} + \frac{y_2}{u_2^2} \text{ oraz } \frac{1}{u^2} = \frac{1}{u_1^2} + \frac{1}{u_2^2}$$

gdzie y jest estymatą wielkości mierzonej a u niepewnością standardową. Można te parametry zapisać w postaci

$$y = y_1\left(\frac{u_2^2}{u_1^2+u_2^2}\right) + y_2\left(\frac{u_1^2}{u_1^2+u_2^2}\right) \text{ oraz } u^2 = \frac{u_1^2 u_2^2}{u_1^2+u_2^2}$$

W pomiarach nazywanych porównaniami ta sama wielkość mierzona wyznaczana jest przez wielu uczestników porównań. Każdy z nich może otrzymać inną wartość estymaty wielkości i związanej z nią niepewności standardowej. Parametry te można traktować jako warunkujące nieznany rozkład prawdopodobieństwa związany z wielkością mierzoną

$$g(\eta|y_1,u_1,\ldots y_N,u_N) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\, u_i} \exp\left(-\frac{(\eta-y_i)^2}{2u_i^2}\right)$$

Powyższe równanie ma jedynie sens, gdy każdej estymatcie wielkości można przypisać rozkład normalny. Znajdując proporcjonalność

$$g(\eta|y_1,u_1,\ldots y_N,u_N) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{(\eta-y_i)^2}{u_i^2}\right] \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{u_i^2}\right)\eta^2 + \left(\sum_{i=1}^{N}\frac{y_i}{u_i^2}\right)\eta\right]$$

oraz wiedząc, że istnieje taka funkcja Gaussa dla której

$$g(\eta|y_1,u_1,\ldots,y_N,u_N) \propto \exp\left[-\frac{(\eta-y)^2}{2u}\right] \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{u^2}\right)\eta^2 + \left(\frac{y}{u^2}\right)\eta\right]$$

możemy otrzymać

$$\frac{y}{u^2} = \sum_{i=1}^{N}\frac{y_i}{u_i^2} \text{ oraz } \frac{1}{u^2} = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{u_i}$$

Na tej podstawie określa się parametry wartości odniesienia dla wyników porównań międzylaboratoryjnych

$$y = u^2\sum_{i=1}^{N}\frac{y_i}{u_i^2} \text{ oraz } u^2 = \left(\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{u_i^2}\right)^{-1}$$

gdzie y_i to estymata wielkości mierzonej otrzymana w i-tym laboratorium pomiarowym, a u_i to niepewność standardowa związana z tą estymatą. Zależności powyższe stosuje się w praktyce przy ocenie wyników pomiarów porównawczych, gdy wielkość mierzoną w postaci np. wzorca bada się w różnych laboratoriach pragnąc uzyskać wynik wartości odniesienia. Wykorzystuje się je przy ocenie wartości odniesienia w porównaniach kluczowych do oceny realizacji wartości jednostki miary SI, poprzez wyznaczenie wartości odniesienia porównań kluczowych. Przyjmuje się ją jako najbliższą realizację jednostki miary SI.

Teoria prawdopodobieństwa warunkowego przedstawiona powyżej dobrze sprawdza się przy opracowaniu wyników porównań międzylaboratoryjnych. Podstawowym, stawianym tu problemem jest pytanie, jaka jest wartość i niepewność wielkości mierzonej, gdy wyniki pomiaru uzyskiwane są w różnych laboratoriach pomiarowych, z których każde wyznacza jej inną wartość wraz z niepewnością. Uzyskiwane wartości wielkości mierzonej są w rozsądny sposób uśredniane wagowo, a rolę tych wag pełnią niepewności pomiaru.

Paweł Fotowicz