Omówienie międzynarodowego dokumentu

Evaluation of measurement data – Supplement 1 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement" – Propagation of distributions using a Monte Carlo method

Istotą niniejszego dokumentu jest przedstawienie zasady propagacji rozkładów prawdopodobieństwa realizowanej poprzez matematyczny model pomiaru jako podstawy obliczania niepewności pomiaru i jej zastosowanie przy użyciu metody Monte Carlo. Zasadę stosuje się, gdy model pomiaru zawiera dowolną liczbę wielkości wejściowych i pojedynczą wielkość wyjściową, rozumianą jako wielkość mierzona. Metoda Monte Carlo jest alternatywą dla klasycznego sposobu obliczania niepewności pomiaru wynikającej z prawa jej propagacji, szczególnie w sytuacji gdy nieuzasadniona jest linearyzacja modelu pomiaru, a rozkład związany z wielkością wyjściową jest asymetryczny. Propagacja rozkładów pozwala na opis wielkości wyjściowej w postaci jej funkcji gęstości prawdopodobieństwa, której wartość oczekiwana reprezentuje estymatę wielkości mierzonej, odchylenie standardowe reprezentuje niepewność standardową związaną z tą estymatą oraz umożliwia wyznaczenie przedziału objęcia dla tej wielkości przy określonym poziomie ufności.

Zakres

Dokument przedstawia numeryczny sposób obliczania niepewności pomiaru mogący mieć zastosowanie dla każdego modelu pomiaru, w którym wielkości wejściowe opisane są dowolną funkcją gęstości prawdopodobieństwa. Sposób ten ma zastosowanie, gdy wyznaczenie funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla wielkości wyjściowej jest możliwe tylko na drodze numerycznej przy użyciu techniki komputerowej.

Dokument obejmuje typowe problemy obliczeniowe niepewności w sytuacjach gdy:

- udziały niepewności mogą mieć znacznie zróżnicowane wartości,
- pochodne cząstkowe są trudne do policzenia,
- rozkład wielkości wyjściowej nie jest gaussowski lub t-Studenta,
- estymata wielkości wyjściowej jest porównywalna z jej niepewnością standardową,
- model matematyczny wielkości mierzonej jest dowolnie skomplikowany,
- rozkłady wielkości wejściowych są niesymetryczne.

Dokument ma zastosowanie, gdy mamy do czynienia z przypadkiem wzajemnie niezależnych wielkości wejściowych, którym przypisane są odpowiednie rozkłady prawdopodobieństwa oraz w sytuacji wzajemnie zależnych wielkości wejściowych, dla których określana jest wspólna funkcja gęstości prawdopodobieństwa.

Dokument również omawia jak prowadzić obliczenia niepewności, aby zapewnić prawidłowe jej wyrażanie z jedną lub dwoma cyframi znaczącymi, uwiarygodniając ich poprawność.

Definicje

Przedstawiono dwadzieścia definicji podstawowych pojęć stosowanych w treści dokumentu, takich jak: rozkład prawdopodobieństwa, dystrybuanta, funkcja gęstości prawdopodobieństwa, rozkład normalny, rozkład *t*-Studenta, wartość oczekiwana, wariancja, odchylenie standardowe, moment, kowariancja, macierz niepewności, przedział objęcia, prawdopodobieństwo objęcia, długość przedziału objęcia, probabilistycznie symetryczny przedział objęcia, najkrótszy przedział objęcia, propagacja rozkładów, podstawa obliczeniowa niepewności GUM, metoda Monte Carlo i tolerancja numeryczna. Niektóre z nich wymagają przytoczenia:

przedział objęcia – przedział zawierający wartość wielkości mierzonej z określonym prawdopodobieństwem, w oparciu o dostępną informację;

długość przedziału objęcia – różnica pomiędzy największą i najmniejszą wartością z przedziału objęcia;

probabilistycznie symetryczny przedział objęcia – przedział dla którego prawdopodobieństwo, że wielkość jest mniejsza od najmniejszej wartości w przedziale, jest równe prawdopodobieństwu, że wielkość jest większa od największej wartości w przedziale;

najkrótszy przedział objęcia – przedział o najkrótszej długości ze wszystkich przedziałów mających to samo prawdopodobieństwo objęcia (poziom ufności);

propagacja rozkładów – metoda obliczeniowa (analityczna, numeryczna, dokładna lub przybliżona) służąca do określenia rozkładu prawdopodobieństwa wielkości wyjściowej na podstawie rozkładów wielkości wejściowych;

podstawa obliczeniowa niepewności GUM – zastosowanie prawa propagacji niepewności do wyznaczania przedziału objęcia, gdy wielkość wyjściowa opisana jest rozkładem normalnym lub Studenta;

metoda Monte Carlo – metoda propagacji rozkładów przy zastosowaniu losowego próbkowania rozkładów prawdopodobieństwa;

tolerancja numeryczna – połowa najmniejszego przedziału zawierającego wszystkie liczby, które są uważane za poprawne dla przyjętej ilości cyfr znaczących [przykładowo dla dwóch cyfr znaczących jak np. 1.8 wszystkie poprawne liczby zawierają się w przedziale od 1.75 do 1.85, a tolerancja numeryczna wynosi (1.85 – 1.75)/2=0,05].

Sposób zapisu

Matematyczny model pomiaru wyrażany jest zależnością funkcyjną

$$Y = f(\boldsymbol{X})$$

gdzie Y jest pojedynczą (skalarną) wielkością wyjściową, a $\boldsymbol{X}$ reprezentuje N wielkości wejściowych $(X_1,\ldots,X_N)^{\mathrm{T}}$. Każda X_i traktowana jest jako zmienna losowa ze zbiorem możliwych wartości ξ_i i wartością oczekiwaną x_i, a Y jako zmienna losowa ze zbiorem możliwych wartości η i wartością oczekiwaną y.

Funkcja gęstości prawdopodobieństwa dla możliwych wartości ξ wielkości wejściowej X jest oznaczana symbolem $g_X(\xi)$. Dla wektorowej wielkości wejściowej, dla której $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1,\ldots,\xi_N)^{\mathrm{T}}$ oznaczana jest $g_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{\xi})$, a w przypadku gdy wielkości X_i są niezależne oznaczana jest $g_{X_i}(\xi_i)$. Funkcja gęstości prawdopodobieństwa wielkości wyjściowej Y oznaczana jest symbolem $g_Y(\eta)$, a jej dystrybuanta $G_Y(\eta)$.

Należy dodać, że symbol f zarezerwowany jest tylko do oznaczania modelu matematycznego, a symbole g i G do oznaczania funkcji gęstości i dystrybuanty wielkości mierzonej.

W dokumencie symbole wielkości oznaczane są dużymi literami: X lub Y a ich estymaty małymi: x lub y. W przypadku oznaczania konkretnych wielkości mierzonych, które mogą być oznaczane zarówno dużymi jak i małymi literami symbol estymaty od symbolu wielkości odróżnia daszek, np. odchylenie długości płytki wzorcowej od jej wartości nominalnej oznacza się δL jako wielkość mierzoną, a $\delta\hat{L}$ jako estmatę odchylenia.

W dokumencie termin „prawo propagacji niepewności" stosuje się, gdy model pomiaru opisany jest szeregiem Taylora ograniczonym tylko do wyrazów pierwszego rzędu, jak również, gdy uwzględniane są wyrazy wyższych rzędów.

Indeks „c" przy oznaczeniu złożonej niepewności standardowej jest pominięty. Niepewność standardowa związana z estymatą y wielkości wyjściowej Y może być zapisywana jako $u(y)$. Użycie oznaczenia $u_c(y)$ pozostaje do przyjęcia, jeżeli jest przydatne do podkreślenia faktu, że symbolizuje złożoną niepewność standardową. Ponadto przymiotnik „złożona" w nazwie „złożona niepewność standardowa" uważa się za zbyteczny i może być pominięty. Jedną z przyczyn tej decyzji jest to, że y wskazuje estymatę wielkości wyjściowej, z którą związana jest niepewność standardowa. Inna przyczyną jest to, że często wyniki obliczeń jednych niepewności stają się punktem wyjścia do obliczenia następnych. Użycie indeksu „c" i przymiotnika „złożona" są niestosowne z powyższych powodów.

Termin „prawdopodobieństwo objęcia" rozumiany jest w ten sam sposób co termin „poziom ufności" (w przeciwieństwie do terminu „przedział objęcia", który nie jest tożsamy z terminem „przedział ufności", rozumianym tylko w sensie statystycznym).

Zasady postępowania

Postępowanie składa się z trzech etapów: opisu wielkości (*formulation*), obliczeń (*propagation*) i zapisu wyniku (*summarizing*). Opis wielkości powinien zawierać:
1) definicję wielkości wyjściowej jako wielkości mierzonej,
2) określenie wielkości wejściowych, od których zależy wielkość wyjściowa,
3) model matematyczny określający relacje pomiędzy wielkościami wejściowymi a wielkością wyjściową,
4) przyjęcie rozkładów prawdopodobieństwa dla wielkości wejściowych.

Obliczenia polegają na realizacji zasady propagacji rozkładów wielkości wejściowych poprzez model pomiaru w celu otrzymania rozkładu dla wielkości wyjściowej. Zapis wyniku polega na przedstawieniu:
1) wartości oczekiwanej jako estymaty wielkości wyjściowej,
2) odchylenia standardowego jako niepewności standardowej związanej z estymatą,
3) przedziału objęcia dla wielkości wyjściowej przy określonym prawdopodobieństwie (poziomie ufności).

Pierwszy etap postępowania realizowany jest przez metrologów. Pozostałe natomiast nie wymagają dodatkowej wiedzy metrologicznej, a jedynie informacji o dopuszczalnej tolerancji numerycznej obliczeń.

Propagacja rozkładów polega na wyznaczeniu dystrybuanty dla wielkości mierzonej w oparciu o zastosowanie metody Monte Carlo

$$G_Y(\eta) = \int_{-\infty}^{\eta} g_Y(z)\,\mathrm{d}z$$

funkcja gęstości prawdopodobieństwa PDF formalnie zdefiniowana jest

$$g_Y(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} g_X(\xi)\,\delta\big(\eta - f(\xi)\big)\,\mathrm{d}\xi_N \ldots \mathrm{d}\xi_1$$

Estymata y wielkości Y jest wartością oczekiwaną $\mathrm{E}(Y)$, a niepewność standardowa $u(y)$ związana z y jest odchyleniem standardowym Y lub pierwiastkiem kwadratowym wariancji $\mathrm{V}(Y)$.

Przedział objęcia obliczany jest z funkcji $G_Y(\eta)$. Niech α oznacza każdą wartość pomiędzy zero i $1-p$, gdzie p jest wymaganym prawdopodobieństwem objęcia (poziomem ufności). Punkty końcowe $100p$% przedziału objęcia dla wielkości wyjściowej Y są wartościami funkcji $G_Y^{-1}(\alpha)$ i $G_Y^{-1}(\alpha+p)$, tzn. są kwantylami rzędu α i $\alpha+p$ rozkładu opisanego dystrybuantą $G_Y(\eta)$. Wybór $\alpha = (1-p)/2$ daje przedział zdefiniowany kwantylami rzędu: $(1-p)/2$ i $(1+p)/2$, który jest probabilistycznie symetryczny. Wybór $\alpha \neq (1-p)/2$ ma miejsce w sytuacji asymetrycznego rozkładu, co skutkuje koniecznością wyznaczenia najkrótszego przedziału objęcia. Wartość α spełnia równanie: $g_Y(G_Y^{-1}(\alpha)) = g_Y(G_Y^{-1}(\alpha+p))$ lub kryterium minimum różnicy: $G_Y^{-1}(\alpha+p) - G_Y^{-1}(\alpha)$. Oba przedziały są jednakowe dla symetrycznego rozkładu prawdopodobieństwa.

Propagacja rozkładów może być realizowana:

a) metodami analitycznymi poprzez matematyczne przedstawienie funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla Y,
b) metodą propagacji niepewności opartą na przybliżeniu funkcji modelu pomiaru pierwszymi wyrazami szeregu Taylora,
c) przez włączenie dodatkowych członów wyższych rzędów wyrazów szeregu Taylora,
d) metodami numerycznymi, szczególnie z zastosowaniem metody Monte Carlo.

Przedstawienie wyniku polega na podaniu:

a) estymaty y wielkości wyjściowej Y,
b) niepewności standardowej $u(y)$ związanej z estymatą y,
c) określonego prawdopodobieństwa (poziomu ufności, np. 95 %),
d) granic przedziału objęcia dla określonego prawdopodobieństwa (np. 95 %),
e) informacji czy jest to przedział probabilistycznie symetryczny czy najkrótszy.

Estymata, niepewność standardowa i granice przedziału powinny być zapisane z taką liczbą dziesiętnych, aby ostatnia znacząca cyfra odpowiadała pozycji cyfry znaczącej przy wyrażaniu niepewności standardowej. Wartość liczbową niepewności standardowej należy zapisywać z jedną lub dwoma cyframi znaczącymi. Przykładem może być zapis, przy uwzględnieniu dwóch cyfr znaczących:

y = 1.024 V, $u(y)$ = 0.028 V,

shortest 95 % coverage interval = [0.983, 1.088] V a przy uwzględnieniu jednej cyfry znaczącej zapis:

$$y = 1.02 \text{ V}, u(y) = 0.03 \text{ V}$$

shortest 95 % coverage interval = [0.98, 1.09] V

Podstawa obliczeniowa niepewności GUM

Stosowany jest matematyczny modelu pomiaru przybliżany szeregiem Taylora, w którym wielkości wejściowe reprezentują ich wartości oczekiwane i odchylenia standardowe. Wartości oczekiwane są najlepszymi estymatami, a odchylenia standardowe niepewnościami standardowymi wielkości wejściowych. Estymata wielkości wyjściowej obliczana jest na podstawie modelu matematycznego pomiaru z estymat wielkości wejściowych, a jej niepewność standardowa na podstawie prawa propagacji niepewności. Wielkość wyjściowa opisywana jest rozkładem normalnym lub *t*-Studenta z określoną liczbą stopni swobody. Procedura postępowania sprowadza się do:

a) wyznaczenia wartości oczekiwanych i odchyleń standardowych na podstawie rozkładów wielkości wejściowych,
b) określenia liczby stopni swobody dla każdej niepewności standardowej,
c) obliczenia kowariancji dla par zależnych wielkości wejściowych,
d) wyznaczenia pochodnych cząstkowych pierwszego rzędu funkcji modelu pomiaru względem wielkości wejściowych,
e) obliczenia estymaty wielkości wyjściowej z funkcji modelu pomiaru,
f) obliczenia współczynników wrażliwości jako pochodnych cząstkowych,
g) obliczenia niepewności standardowej wielkości wyjściowej,
h) obliczenia wypadkowej liczby stopni swobody z formuły Welch-Satterthwaitea,
i) obliczenia niepewności rozszerzonej i stąd przedziału objęcia dla wielkości wyjściowej przy założonym poziomie ufności, przez odpowiednie przemnożenie złożonej niepewności standardowej przez współczynnik rozszerzenia, biorąc pod uwagę rozkład Gaussa lub Studenta.

Obliczanie metodą Monte Carlo

Metoda prowadzi do uzyskania numerycznej aproksymacji dystrybuanty ***G*** dla wielkości wyjściowej. Procedura realizowana jest w kolejnych krokach postępowania:

a) wybór liczby próbkowania (symulacji) *M*,
b) wygenerowanie *M* prób *N* elementowego zbioru wielkości wejściowych,
c) dla każdej próby obliczenie na podstawie funkcji modelu pomiaru odpowiadającej mu wartości wielkości wyjściowej,
d) posortowanie wartości wielkości wyjściowych w niemalejącym porządku, używając posortowanych wartości do przybliżenia dystrybuanty wielkości wyjściowej ***G***,
e) wyznaczenie z dystrybuanty ***G*** estymaty wielkości wyjściowej i związanej z nią niepewności standardowej,
f) wyznaczenie z dystrybuanty ***G*** odpowiedniego przedziału objęcia dla określonego poziomu ufności *p*.

Istotą stosowania metody jest:

a) redukcja wysiłku analitycznego związanego z wykonywaniem skomplikowanych obliczeń pochodnych cząstkowych dla nieliniowych równań pomiaru,
b uściślenie wyznaczenia estymaty wielkości wyjściowej dla nieliniowej funkcji modelu pomiaru,
c) uściślenie wyznaczania niepewności standardowej związanej z estyamtą wielkości wyjściowej dla nieliniowych równań modeli pomiaru, szczególnie dla niegaussowskich funkcji gęstości wielkości wejściowych,
d) wyznaczanie przedziału objęcia odpowiadającego określonemu poziomowi ufności, gdy funkcja gęstości wielkości wyjściowej nie może być przybliżona rozkładem Gusssa lub Studenta, co ma miejsce przy dominującej składowej o rozkładzie niegaussowskim lub nieliniowym modelu pomiaru,
e) brak konieczności obliczania współczynnika rozszerzenia.

Wartość M, liczba losowań Monte Carlo, powinna być określona a priori i dużo większa, np. co najmniej 10^4 razy większa, od liczby $1/(1-p)$. Wpływa na nią zalecany stopień przybliżenia zależny od kształtu funkcji gęstości wielkości wyjściowej oraz wymaganego poziomu ufności. Liczba losowań $M = 10^6$ często wystarcza do wyznaczenia 95 % przedziału objęcia, którego długość jest poprawna przy zgodności jej wyrażenia z jedną lub dwoma cyframi znaczącymi.

Funkcja modelu pomiaru obliczana jest dla każdego z M losowań, na podstawie funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla każdej z N wielkości wejściowych. Poszczególne losowania oznaczane są: $x_1,\dots,x_M$, gdzie r-te losowanie x_r zawiera wartości $x_{1,r},\dots,x_{N,r}$, a $x_{i,r}$ jest wartością wylosowaną z funkcji gęstości wielkości wejściowej X_i. Funkcja modelu wartości ma postać:

$$y_r = f(x_r) \text{ dla } r = 1,\dots, M$$

Dyskretna reprezentacja $\boldsymbol{G}$ dystrybuanty $G_Y(\eta)$ wielkości wyjściowej Y może być otrzymana następująco:

a) sortujemy uzyskane w symulacji Monte Carlo wartości wielkości wyjściowej y_r zgodnie z niemalejącym porządkiem, oznaczając posortowane wartości $y_{(r)}$,
b) tworzymy kompletny zbiór wartości $y_{(r)}$ reprezentujący numeryczną postać $\boldsymbol{G}$.

Histogram zbioru wartości $y_{(r)}$ stanowi przybliżenie funkcji gęstości prawdopodobieństwa $g_Y(\eta)$ dla wielkości wyjściowej Y. Umożliwia zobrazowanie tej funkcji w celu poznania jej natury, np. stopnia asymetrii.

Średnia

$$\tilde{y} = \frac{1}{M}\sum_{r=1}^{M} y_r$$

i odchylenie standardowe wywodzące się z zależności

$$u^2\left(\tilde{y}\right) = \frac{1}{M-1}\sum_{r=1}^{M}\left(y_r - \tilde{y}\right)^2$$

traktowane są jako estymata i niepewność standardowa wielkości wyjściowej Y.

Przedział objęcia oznaczany [y_{low}, y_{high}] otrzymywany jest z dyskretnej reprezentacji $\boldsymbol{G}$. Jeżeli $q = pM$ jest liczbą całkowitą to jego granice reprezentują wartości: $y_{low} = y_{(r)}$ oraz $y_{high} = y_{(r+q)}$ dla każdego $r = 1,\ldots, M-q$. Dla probabilistycznie symetrycznego przedziału jest $r=(M-q)/2$ pod warunkiem, że r jest liczbą całkowitą, a gdy nie to stanowi część całkowitą liczby $(M-q+1)/2$. Najkrótszy przedział uzyskuje się dla takiego r^* dla którego: $y_{(r^*+q)} - y_{(r^*)} \leq y_{(r+q)} - y_{(r)}$.

Niech n_{dig} oznacza liczbę cyfr znaczących służących do przedstawiania wartości z. Tolerancja numeryczna związana z tą wartością dana jest zależnością

$$\delta = \frac{1}{2} 10^{e}$$

gdy wartość wyrazimy jako $z = c \times 10^{e}$ (c liczba całkowita wyrażona n_{dig} cyframi).

Zalecana procedura postępowania:

a) przyjmij n_{dig} jako małą liczbę całkowitą,
b) przyjmij $M = \max(J, 10^4)$, gdzie $J \geq 100/(1-p)$ najmniejsza liczba całkowita,
c) przyjmij $h = 1$ jako pierwszy krok postępowania,
d) przeprowadź symulację Monte Carlo na próbie M wartości,
e) używając M wartości otrzymanych z funkcji modelu pomiaru w postaci: $y_1,\ldots,y_M$ oblicz $y^{(h)}$ jako estymatę Y, $u(y^{(h)})$ jako niepewność standardową oraz dolną $y_{low}{}^{(h)}$ i górną $y_{high}{}^{(h)}$ granicę przedziału objęcia,
f) jeżeli $h = 1$ to powiększ h o jeden i powtórz procedurę od kroku d),
g) oblicz odchylenie standardowe s_y związane ze średnią estymat $y^{(1)},\ldots,y^{(h)}$ na podstawie

$$s_y^2 = \frac{1}{h(h-1)} \sum_{r=1}^{h} \left(y^{(r)} - y \right)^2, \quad \text{gdzie } y = \frac{1}{h} \sum_{r=1}^{h} y^{(r)}$$

h) oblicz powyższe statystyki dla $u(y)$, y_{low} i y_{high},
i) użyj wszystkich wartości funkcji modelu pomiaru $h \times M$ aby określić $u(y)$,
j) oblicz tolerancję numeryczną δ związaną z $u(y)$,
k) jeżeli któraś z wartości statystyk: $2s_y$, $2s_{u(y)}$, $2s_{y_{low}}$, $2s_{y_{high}}$ przekracza δ powiększ h o jeden i wróć do kroku d),
l) stwierdziwszy, że wszystkie obliczenia są stabilne użyj wszystkich wartości funkcji modelu pomiaru ($h \times M$) aby wyznaczyć: y, $u(y)$ oraz $100p$ % przedział objęcia.

Walidacja obliczeń

Zalecany sposób postępowania:

a) zastosowanie prawa propagacji niepewności w celu uzyskania $100p$ % przedziału objęcia: $y \pm U_p$ dla wielkości wyjściowej, gdzie p jest określonym prawdopodobieństwem (poziomem ufności),
b) zastosowanie zalecanej procedury obliczeniowej dla metody Monte Carlo w celu otrzymania wartości niepewności standardowej $u(y)$ oraz granic y_{low} i y_{high} $100p$ % przedziału objęcia dla wielkości wyjściowej.

Następnie należy sprawdzić, czy otrzymane przedziały objęcia zgadzają się co do ustalonej tolerancji numerycznej δ. W tym celu oblicza się

$$d_{\mathrm{low}} = \left| y - U_p - y_{\mathrm{low}} \right|$$
$$d_{\mathrm{high}} = \left| y + U_p - y_{\mathrm{high}} \right|$$

jako bezwzględne wartości odpowiadające granicom przedziału. Jeżeli wartości te są nie większe niż δ to można uznać obliczenia wykonane na podstawie prawa propagacji niepewności za zwalidowane.

W celu walidacji obliczeń przy użyciu innych procedur numerycznych związanych z realizacją metody Monte Carlo zaleca się zmniejszenie tolerancji numerycznej do $\delta/5$.

Dokument ponadto zawiera:

- definicje wielu rozkładów prawdopodobieństwa dla wielkości wejściowych. Są nimi rozkłady: prostokątny, trójkątny, trapezowy (w tym krzywoliniowy), typu U, normalny, *t*-Studenta, wykładniczy i gamma, dla których podano funkcje gęstości prawdopodobieństwa i ich parametry: wartość oczekiwaną i wariancję,
- przykłady dotyczące różnych aspektów obliczeniowych, takich jak prosty model addytywny oraz związanych z wzorcowaniem: masy, miernika mocy mikrofalowej i płytki wzorcowej,
- opis próbkowania w postaci generatora liczb pseudolosowych dla rozkładu prostokątnego i normalnego.

Opracowanie powstało na podstawie dokumentu OIML G 1-101 Edition 2007 (E), zaakceptowanego przez Przewodniczącego Międzynarodowego Komitetu Metrologii Prawnej (CIML) w lipcu 2007 roku.

Paweł Fotowicz