Ocena dokładności obliczania niepewności pomiaru metodą Monte Carlo zgodnie z zalecanym algorytmem postępowania

Paweł Fotowicz

Główny Urząd Miar

Przedstawiono analizę dokładności algorytmu obliczeniowego niepewności pomiaru zalecanego przez najnowszy dokument Suplement 1 do Przewodnika. Można stwierdzić, że przedstawiona tam procedura numeryczna pozwala na wiarygodne wyznaczanie niepewności z dopuszczalną liczbą dwóch cyfr znaczących, zgodnie z przyjętą definicją przedziału rozszerzenia w oparciu o propagację rozkładów. Nie wymaga przy tym stosowania specjalnego oprogramowania do realizacji obliczeń metodą Monte Carlo. Można go stosować przy wykorzystaniu powszechnie dostępnego narzędzia obliczeniowego jakim jest arkusz kalkulacyjny, dostępny dla każdego użytkownika komputera osobistego.

Evaluation of accuracy calculation of measurement uncertainty using Monte Carlo method according to adaptive procedure

Accuracy analysis of measurement uncertainty calculation using Monte Carlo method according to adaptive procedure is presented. The adaptive procedure is described in Supplement 1 to the Guide to the expression of uncertainty in measurement. Numerical algorithm enables calculation of uncertainty with recommended two significant digits according to the definition of the coverage interval based on propagation of distributions. The procedure does not require advanced and specialized computing programs to perform the Monte Carlo simulation. The algorithm may be realized using common computational tools, such as spreadsheet software. It enables validation of uncertainty calculation that realized classical method using law of uncertainty propagation. The procedure ensures credibility of uncertainty calculation corresponding to the recommended coverage probability.

1. Wprowadzenie

W 2008 roku na stronach internetowych Międzynarodowego Biura Miar (BIPM) i Międzynarodowej Organizacji Metrologii Prawnej (OIML) został upubliczniony nowy dokument dotyczący wyrażania niepewności pomiaru, promujący metodę propagacji rozkładów realizowaną przy zastosowaniu symulacji Monte Carlo [1]. Dokument przedstawia praktyczny algorytm postępowania przy obliczaniu niepewności, przeznaczony do wykonywania metodą numeryczną. Jak wiadomo metoda Monte Carlo charakteryzuje się określonym rozrzutem obliczeniowym, w zależności od liczebności próby losowej. Powstaje zatem zagadnienie, jakiej należy oczekiwać dokładności obliczeniowej niepewności pomiaru, przy zastosowaniu powszechnie dostępnego narzędzia informatycznego stosowanego w laboratoriach pomiarowych, jakim jest arkusz kalkulacyjny, wykorzystując wbudowany w nim generator liczb losowych.

2. Zalecany algorytm postępowania

Pierwszym krokiem postępowania jest wybór liczby próbkowania M. Wybór wartości tej liczby zależy od przyjętego prawdopodobieństwa rozszerzenia, dla którego obliczana jest niepewność pomiaru. Dla prawdopodobieństwa $p = 95$ % liczba ta wynosi $M = 10\,000$. Jest ona słusznym kompromisem, gdy do obliczeń chcemy użyć standardowego narzędzia informatycznego, pomiędzy dokładnością a jego możliwościami obliczeniowymi. Drugim krokiem postępowania jest wygenerowanie zbiorów wartości dla wielkości wejściowych zgodnie z przyjętym dla nich rozkładem prawdopodobieństwa. Na ogół przyjmuje się dla tych wielkości standardowe rozkłady: Studenta, normalny, trójkątny lub prostokątny. Następnie wyznacza się zbiór możliwych wartości dla wielkości wyjściowej na postawie równania pomiaru i przyjętych rozkładów dla wielkości wejściowych. W celu wyznaczenia dystrybuanty rozkładu dla wielkości wyjściowej sortuje się uzyskane wartości w porządku niemalejącym. Tworzą one dziedzinę tej funkcji. Argumentom przypisuje się kolejne prawdopodobieństwa, tworzące zbiór wartości dystrybuanty rozkładu wyjściowego. Dla wartości dystrybuanty równej prawdopodobieństwu 0,975 i 0,025 odczytuje się wartości jej argumentów, których różnica wyznacza przedział rozszerzenia. Połowa tego przedziału jest miarą niepewności rozszerzonej dla prawdopodobieństwa 95 %, przy założeniu liniowego lub linearyzowanego modelu funkcji pomiaru. Ze zbioru argumentów dystrybuanty wyznacza się również średnią jako miarę estymaty wielkości wyjściowej oraz oblicza się odchylenie standardowe eksperymentalne, będące miarą niepewności standardowej wielkości wyjściowej.

3. Generowanie rozkładów dla wielkości wejściowych

Korzystając ze standardowego narzędzia obliczeniowego jakim jest arkusz kalkulacyjny EXCEL można do wygenerowania standardowych rozkładów prawdopodobieństwa wykorzystać wbudowaną funkcję o nazwie: los. Funkcja ta pozwala na wyznaczenie zbioru wartości losowych o rozkładzie równomiernym w zakresie od 0 do 1. Aby wygenerować dowolny zbiór wartości o rozkładzie prostokątnym i symetrycznym względem zera (jako wartości oczekiwanej) oraz dowolnej wartości odchylenia standardowego, można zastosować równanie

$$\mathrm{P}(0,u) = 2 \cdot \sqrt{3} \cdot (\mathrm{los} - 0{,}5) \cdot u \tag{1}$$

gdzie u to dowolna wartość niepewności standardowej związanej z wielkością wejściową. W przypadku rozkładu trójkątnego, o tych samych parametrach, można zastosować formułę, która realizuje złożenie dwóch jednakowych rozkładów prostokątnych

$$\mathrm{T}(0,u) = \sqrt{6} \cdot (\mathrm{los} + \mathrm{los} - 1) \cdot u \tag{2}$$

Aby uzyskać rozkład normalny, można dokonać złożenia go z 12. rozkładów prostokątnych. Jest to o tyle efektywne działanie w arkuszu, iż pozwala na otrzymanie zbioru wartości losowych o odchyleniu standardowym równym 1. Dlatego rozkład normalny, o tych samych parametrach co powyżej, otrzymujemy stosując równanie

$$\mathrm{N}(0,u) = \left(\underbrace{\mathrm{los} + \ldots + \mathrm{los}}_{12} - 6 \right) \cdot u \tag{3}$$

W celu otrzymania rozkładu t-Studenta o określonej liczbie stopni swobody $\nu = n - 1$ należy postępować zgodnie z rozumowaniem W. S. Gosseta, pomysłodawcy tego rozkładu. Z populacji o rozkładzie normalnym losujemy n wartości, dla których obliczamy średnią i odchylenie standardowe eksperymentalne średniej. Zmienna t jest ilorazem tych dwóch wartości. Zatem rozkład można zrealizować w dwóch krokach postępowania

$$S(0,u)\begin{cases}=\underbrace{\text{los}+\ldots+\text{los}}_{12}-6\\ =u\cdot\sqrt{n}\cdot\bar{x}(1\div n)/s(1\div n)\end{cases} \tag{4}$$

gdzie $\bar{x}(1 \div n)$ to średnia z n kolejnych wylosowanych wartości, a $s(1\div n)$ to odchylenie standardowe eksperymentalne tych wartości.

Biorąc pod uwagę przedstawione zależności można wyznaczyć numeryczne dystrybuanty rozkładów, zgodnie z przedstawionym algorytmem postępowania, sortując otrzymane wartości argumentów w porządku niemalejącym, a następnie przypisując im kolejne prawdopodobieństwa.

4. Dokładność obliczania niepewności pomiaru

Symulacja Monte Carlo charakteryzuje się rozrzutem wyników obliczania. Za każdym razem przy jej wykonywaniu otrzymujemy inny wynik. Wyniki te na ogół się nie powtarzają, lecz ich zmiany mieszczą się w określonym zakresie, wyznaczającym dokładność obliczeniową. Dokładność ta powinna zapewnić wiarygodność obliczania niepewności rozszerzonej z dwiema cyframi znaczącymi przy jej wyrażaniu. W tym wypadku przyjmuje się błąd obliczania niepewności do 5 % wyznaczonej jej wartości [2].

O dokładności obliczeniowej metody Monte Carlo przy użyciu arkusza kalkulacyjnego można się przekonać wykonując obliczenia dla prostego addytywnego modelu pomiaru zawierającego cztery składowe, z których każda opisana jest innym rozkładem prawdopodobieństwa. Brano pod uwagę rozkłady: Studenta o liczbie stopni swobody $v = 2$, normalny, trójkątny i prostokątny. Przeprowadzono obliczenia gdy wszystkie udziały są jednakowe oraz gdy mamy do czynienia z dominującą składową.

Największe rozrzuty wyników można odnotować dla modelu pomiaru z dominującą składową o rozkładzie Studenta, dla którego rozrzut obliczania niepewności rozszerzonej przekracza 2 % jej wartości. Najmniejszy rozrzut odnotowano dla dominującej składowej o rozkładzie prostokątnym, którego wartość nie przekroczyła 0,5 %. Natomiast dla dominujących składowych z rozkładem normalnym i trójkątnym wartość ta nie przekroczyła 1 %.

Dodatkowo wykonano obliczenia dla powyższych przypadków przy użyciu szybkiej transformaty Fouriera [3], w celu wyznaczenia niepewności rozszerzonej metodą splotu matematycznego rozkładów składowych. We wszystkich analizowanych przypadkach obliczeniowych błąd ów nie przekraczał wartości 1 %, a przy dominujących składowych o rozkładzie normalnym, trójkątnym czy prostokątnym nawet wartości 0,5 %.

Przeprowadzone obliczenia dowodzą, że we wszystkich analizowanych przypadkach błąd nie przekracza 5 % obliczonej wartości, co pozwala stwierdzić, że metoda zapewnia wiarygodność wyznaczania niepewności rozszerzonej z dwiema cyframi znaczącymi. Co więcej, zwiększenie liczby powtarzanych symulacji nie powoduje zwiększonego rozrzutu otrzymywanych wartości. To samo dotyczy większej liczby składowych, niezależnie od tego czy mamy do czynienia z brakiem lub występowaniem dominacji jakiejkolwiek składowej niepewności. Największy wpływ na rozrzut uzyskiwanych wartości ma składowa opisana rozkładem Studenta, przy czym ten wpływ maleje wraz z rosnącą liczbą stopni swobody, co jest o tyle logiczne, iż większa liczba stopni swobody oznacza większe zaufanie do samej składowej w związku ze zmniejszającym się udziałem statystycznej niepewności w niepewności standardowej składowej budżetu (tzn. niepewność niepewności [4]). Podobne obliczenia przeprowadzone dla dziesięciu składowych w budżecie niepewności wykazały, że rozrzut nieznacznie przekraczał 1 % obliczanej niepewności rozszerzonej, niezależnie od dominacji jakiejkolwiek składowej.

5. Podsumowanie

Numeryczny algorytm obliczania niepewności pomiaru zalecany przez dokument [1] pozwala na wiarygodne jej wyznaczanie z dopuszczalną liczbą dwóch cyfr znaczących zgodnie z przyjętą definicją przedziału rozszerzenia w oparciu o zasadę propagacji rozkładów. Nie wymaga przy tym stosowania specjalnego oprogramowania do realizacji obliczeń metodą Monte Carlo. Można go stosować przy wykorzystaniu powszechnie dostępnego narzędzia obliczeniowego jakim jest arkusz kalkulacyjny, dostępny dla każdego użytkownika komputera osobistego. Umożliwia to skuteczną walidację obliczeń niepewności pomiaru realizowaną klasyczną metodą z wykorzystaniem prawa propagacji niepewności, dając poczucie pewności laboratorium pomiarowemu, że obliczenia te zostały wykonane poprawnie i zgodnie z międzynarodowymi zaleceniami.

Literatura

[1] Evaluation of measurement data – Supplement 1 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement" – Propagation of distributions using a Monte Carlo method. JCGM 101:2008.

[2] *Expression of the Uncertainty of Measurement in Calibration*. European co-operation for Accreditation. Publication Reference EA-4/02, 1999.

[3] M. J. Korczyński, A. Hetman, P. Fotowicz: *Fast Fourier Transformation – An Approach to Coverage Interval Calculation vs. Approximation Methods*. International Workshop on Advanced Methods for Uncertainty Estimation in Measurement, 2005.

[4] *Wyrażanie niepewności pomiaru*. Przewodnik. Główny Urząd Miar 1999.