УДК 519.00.00

В.В. Новіков

УНК «Інститут прикладного системного аналізу» НТУУ «КПІ», Київ, Україна

РОЗРАХУНОК НЕВИЗНАЧЕНОСТІ ПРИПИСАНИХ ЗНАЧЕНЬ ФІЗИЧНИХ ВЕЛИЧИН НАЦІОНАЛЬНИХ ЕТАЛОНІВ ЗА АДАПТИВНИМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В статті розглянута задача оцінювання невизначеності приписаних значень фізичних величин національних еталонів. Для підвищення точності другої фази оцінювання(обчислення) цієї задачі запропоновано застосовувати оригінальний адаптивний метод Монте-Карло, що показав високу ефективність для оцінювання невизначеності результатів вимірювань. Ефективність методу доведена на прикладі оцінювання невизначеності приписаного значення національного еталона електролітичної провідності рідини.

Ключові слова: *невизначеність вимірювання, метод Монте-Карло, адаптивність, еталон, ЕПР.*

Вступ

Більшість галузей діяльності людини так чи інакше пов'язана з проведенням вимірювань. При цьому, достовірність рішень, що приймаються на основі результатів вимірювань, залежить від точності останніх. Підвищення точності результатів вимірювань є однією за найважливіших проблем сучасної метрології [1, 2].

Невизначеність всіх результатів вимірювань тою чи іншою мірою, прямо чи через ланку інших вимірювань залежать від невизначеності національних еталонів [2]. Саме тому, до оцінки невизначеності приписаних значень фізичних величин національних та інших еталонів слід відноситись особливо уважно.

Як свідчать останні дослідження [3, 4] та додаток до ISO GUM [5, 6], використання методу Монте-Карло (далі – ММК) для розрахунку невизначеності вимірювань в загальному випадку дозволяє отримати більш точну оцінку невизначеності. Проблемою на шляху реалізації ММК є його обчислювальна складність та відсутність гарантій щодо точності отримуваних оцінок. На погляд автора, модифікація ММК- адаптивний ММК [7] дозволяє вирішити ці проблеми.

Метою даної роботи є дослідження можливості підвищення достовірності обробки результатів вимірювань національних еталонів за рахунок сучасних обчислювальних та інформаційних технологій для реалізації адаптивного ММК.

У розділі 1 розглянуто постановку задачі та пропонований варінт її вирішення. Розділ 2 описує адаптивний метод Монте-Кало для розрахунку невизначеності в вимірюваннях (далі – ММК). Розділ 3 описує оцінювання невизначеності національного еталону електролітичної провідності рідини, що зберігається в ДП «Укрметртестстандарт» Держспоживстандарту України. В тому ж розділі наведено результати обчислення невизначеності за адаптивним ММК та проведено їх аналіз. Підсумування та висновки надані у Висновках.

1. Постановка задачі

Як відомо, задача оцінювання невизначеності складається з двох фаз – формулювання моделі   та обробка даних за цією моделлю [3, 5, 6]. На першій фазі метролог визначає математичну модель вимірювання, вхідні величини, функції їх розподілу(або функції щільності) та параметри цих функцій, матрицю кореляції/коваріації для сумісних функцій розподілу. Слід зауважити, що побудова математичної моделі є окремою складною актуальною задачею, варіанти можливих розв'язків якої можна знайти, наприклад, в [5, 8].

Перша фаза оцінювання, тобто шляхи отримання інформації щодо математичної моделі для конкретного вимірювання не є предметом даної роботи. Вважаємо, що перша фаза оцінювання вже виконана і отримані достовірні вхідні дані для подальших розрахунків.

Друга фаза оцінювання невизначеності полягає в обчисленні тих даних, що отримані на попередній фазі з метою оцінки функції розподілу (або PDF), оцінок моментів та інтервалу покриття для заданої імовірності вимірюваної величини для практичних задач. Друга фаза оцінювання невизначеності є чисто обчислювальною задачею і не потребує будь-якої інформації чи методів з метрології чи іншої області застосування з якої була отримана математична модель.

Слід також зазначити, що другу фазу оцінювання, тобто обчислення проводять з певною точністю, що визначається першою фазою оцінювання невизначеності – в тих припущеннях та неточностях, що були зроблені під час дослідження. В будь-якому випадку обчислення не повинне зменшувати точність, що була отримана на першій фазі оцінювання [5, 6].

Саме така ситуація може спостерігатись при оцінюванні невизначеності приписаних величин еталонів, коли перша фаза оцінювання виконана з високою точністю, а з використанням класичного підходу ISO GUM в другій фазі оцінювання можуть виникати неточності в обчисленні, зокрема, за рахунок не лінійності моделі та специфічного закону розподілу імовірностей результату вимірювання. Тобто, друга фаза оцінювання може погіршувати точність того результату, що був отриманий метрологом на першій фазі.

Як показано в ряді робіт [3, 4, 6, 7], класичний підхід ISO GUM не може задовольняти вимоги щодо точності для всіх практичних задач. Це обумовлено численними припущеннями та округленнями, що виникають під час обчислень.

Для того, щоб друга фаза оцінювання невизначеності приписаних значень еталонів не погіршувала результати, що отримані на першій фазі пропонується застосовувати адаптивний ММК.

2. Адаптивний ММК

Алгоритм класичного ММК оцінювання невизначеності вимірювань коротко описується наступними кроками (для одновимірного випадку) [6]:

1. Згідно до заданих функцій щільності розподілів вхідних величин $g_{in}(x)$ (або сумісної щільності) згенерувати M реалізацій наборів вхідних величин. Для цього повинні використовуватись генератори псевдовипадкових чисел з періодом набагато більшим за M.

2. Використовуючи математичну модель вимірювання $f(x)$ обчислити M значень $y_1 ... y_M$.

3. За результат вимірювання приймається y – середнє арифметичне набору $y_1 ... y_M$, стандартну невизначеність – оцінку стандартного відхилення, наприклад середньоквадратичне відхилення $y_1 ... y_M$. Отримані $y_1 ... y_M$ сортуються за зростанням якими можна оцінювати PDF. Визначається інтервал покриття для імовірності p:

$$y_{[(1-p)*M/2]}, y_{[(1+p)*M/2]},$$

припускаючи симетричний закон розподілу. За необхідності, можна отримати оцінки вищих моментів з отриманої послідовності реалізацій.

Згідно центральної граничної теореми оцінка першого моменту збігається зі швидкістю $1/\sqrt{M}$, якщо стандартне відхилення y існує, тобто не залежить від кількості вхідних величин, на відміну від задачі чисельного інтегрування[6].

В роботах [3, 4, 6, 9] рекомендують вибирати $M = 10^5 ... 10^6$ для практичних вимірювальних задач, з аргументуванням, що для більшості задач такого M повинно бути достатньо для отримання необхідної точності.

Якщо вибирати M апріорі таким чином, то можлива реалізація наступних випадків:

1. Алгоритм буде задовольняти вимоги задачі щодо точності розрахунків, але будуть проведені зайві обчислення. Тобто, алгоритм буде неефективним, особливо зважаючи на те, що для складних задач з великою кількістю вхідних величин час роботи алгоритму є досить суттєвий – години (для $M = 10^7$) на сучасних комп’ютерах, але давати достовірні результати.

2. Вибраного M буде недостатньо для даної задачі і алгоритм не буде задовольняти вимоги щодо точності для конкретної задачі. При чьому, цей факт може залишитись невідомим для дослідника.

Розглядаючи практичну сторону реалізації ММК, з врахуванням кількості реалізацій методу, складності обчислень та розмірності вимірювальних задач, його застосування потребує значного обчислювального часу. В ряді робіт [10, 11] показано, що не вистачало обчислювальних потужностей комп'ютерів для отримання результатів оцінювання невизначеності практичних вимірювальних задач, наприклад, оцінювання невизначеності приписаного значення еталону довжини [10] з застосуванням ММК. Зрозуміло, що для вирішення таких задач можна застосовувати потужності кластерних супер-ЕОМ, що може вирішити проблему часу обчислення, але з економічної точки зору необхідно шукати інші шляхи вирішення даної проблеми.

Питанням вибору параметру M алгоритму ММК залишається відкритим. Більше того, цей параметр не можна вибрати якимось чином щоб гарантовано отримувати необхідну точність із-за випадкової природи моделювання. Тому логічним кроком до підвищення ефективності алгоритму, зменшення обчислень та гарантування точності є модифікація ММК.

Пропонується [7] ввести адаптивність до алгоритму ММК. Зважаючи на стохастичну природу чисельного методу, адаптивний ММК реалізує послідовний вибір параметра M в залежності від заданої точності (до оцінок точності). Адаптивний ММК перевіряє умову щодо достатньої достовірності своїх результатів(у вигляді обмеження на довірчий інтервал, наприклад,

$$| y_{[M\alpha - 2\sqrt{M\alpha(1-\alpha)}]} - y_{[M\alpha + 2\sqrt{M\alpha(1-\alpha)}]} | \le \delta .$$

для імовірності 0,95) і, якщо вона не виконується, то продовжує збільшення кількості реалізацій до того моменту, поки умови щодо достовірності оцінок невизначеності буде виконано. Отримані результати обчислювального експерименту показали високу ефективність даної модифікації [7]. Окрім того, метод може гарантувати точність отримуваних результатів з певною імовірністю. Збіжність такої модифікації очевидним чином витікає зі збіжності класичного ММК.

Адаптивний ММК має меншу обчислювальну складність ніж ММК, а отже, менший час обчислення та гарантує точність отриманих оцінок невизначеності.

Обмеження методу [12] стосуються застосувань, де невизначеність результату вимірювання в рази перевищує саме абсолютне значення результату вимірювання.

Очевидно, що ці обмеження не розповсюджується на оцінювання невизначеності вимірювань приписаних значень еталонів.

3. Невизначеність еталону електролітичної провідності рідини

Розглянемо оцінювання невизначеності одного із багатьох національних еталонів, що зберігаються в ДП «Укрметртестстандарт» Держспоживстандарту України – еталону електролітичної провідності(далі ЕПР) при приписаному значенні 0,005 См/м [12]. Математична модель вимірювання має такий вигляд:

$$k = KG(1 + \alpha\Delta T) \qquad (1)$$

де k – ЕПР, См/м;

К – значення сталої кондуктометричної комірки, м$^{-1}$; G – значення електричної провідності розчину електроліту, См;

α - температурний коефіцієнт електроліту, °C^{-1} (було вибрано $\alpha = 0{,}018$ °C^{-1} згідно з рекомендаціями МОЗМ [12] для розчинів KCl);

ΔT – значення відхилення температури в робочій зоні термостату від номінального значення для розчину, °C.

В свою чергу, значення сталої кондуктометричної комірки вимірюється згідно власної моделі:

$$K = \frac{4l}{\pi d^2}, \qquad (2)$$

де l – довжина кондуктометричної комірки, м; d – діаметр кодуктометричної комірки, м.

Бюджет невизначеності згідно [12] в ДП «Укрметртестстандарт» наведено в табл. 1 (приводиться мовою оригіналу).

Таблиця 1

Бюджет невизначеності

Uncertainty source	Estimate	Assumed distribution	Standard uncertainty	Sensitivity coefficient	Contribution to standard uncertainty
X_I	x_I		Ui	C_I	$u_I(y)$
Conductance, S:	1.6686E-5				
Repeatability (Type A)		normal	2.7E-9 S		
Uncertainty of the bridge measurements (Type B)		rectangular	5.8E-9 S		
u_g, S/m			6.4E-9 S	98.15 1/m	1.9E-6
Cell constant:	298.150 1/m				
Length (Type B)	2.4166E-2 m	rectangular	3.4E-7 m		
Diameter (Type B)	1.0160E-2 m	rectangular	1.3E-6 m		
of cell electric field (estimate) (Type B)	0.01 1/m	rectangular	1E-2 1/m		
u_K, S/m			4.4E-2 1/m	1.667E-5 S	7.3E-7
Temperature, °C	25.000 °C				
Measurement (Type B)	0.003 °C	rectangular	1.7E-3 °C		
Stability of thermostating (Type B)	0.002 °C	rectangular	1.2E-3 °C		
u_t, S/m				1E-4 S/m °C	2.1E-7

Проведемо обчислення невизначеності згідно класичного підходу ISO GUM.

За даними табл. 1 та (1), (2) були отримані наступні результати: розширена невизначеність (p = 95%) складає $U = 4,6*10^{-6}$ См/м, оцінене приписане значенням рівне k = 0,0049741 См/м з припущенням нормального закону розподілу результату вимірювання (k = 2).

Проведемо другу фазу оцінювання невизначеності еталону ЕПР за адаптивним методом Монте-Карло.

В розроблений авторами програмний пакет для реалізації адаптивного ММК[7] внесемо інформацію про значення та розподіл кожного джерела невизначеності та математичну модель вимірювання. За початкове значення M візьмемо 10^4, будемо збільшувати цей параметр кожного адаптивного кроку на 10^4, вимоги щодо точності оцінки розширеної невизначеності: $\Delta = 10^{-7}, p = 0,95$. Алгоритм закінчив свою роботу за долі секунд, реальне $\Delta = 0,975*10^{-7}, p = 0,95$, кількість реалізацій M для такої точності знадобилось $9*10^4$.

Отриманий результат: розширена невизначеність (p = 95%) $U = 4*10^{-6}$ См/м, оцінене приписане значенням рівне k = 0,0049741 См/м. Метод не вимагає ніяких припущень щодо закону розподілу. Більше того, приписане значення, що отримане ДП «Укрметртестстандарт» k = 0,0049749 См/м ніколи не досягається при p = 95%(досягається 0,0049748).

Як видно, результат оцінювання розширеної невизначеності національного еталону ЕПР відрізняється з результатом оціненим за адаптивним ММК та підходом ISO GUM. Це пояснюється перш за все нелінійністю математичної моделі вимірювання та законом розподілу результату вимірювання, що відрізняється від нормального, що приводить до неточності розрахунків оцінок невизначеності за ISO GUM.

Для більш ґрунтовного порівняння оцінок розширеної невизначеності послідовно збільшимо точність обчислення до

$$\Delta = 10^{-8}, p = 0,95$$

та

$$\Delta = 10^{-9}, p = 0,95$$

за адаптивним ММК. Таку задачу виконати на сучасному комп'ютері виявилося досить складно, навіть з застосуванням адаптивного ММК.

Для першого випадку знадобилось $M = 6*10^6$ реалізацій та близько десяти хвилин на обчислення, реальне $\Delta = 0,999*10^{-8}, p = 0,95$. Для другого випадку знадобилось $M = 3,4*10^8$ реалізацій та більше 13 годин на обчислення, реальне $\Delta = 0,999*10^{-9}, p = 0,95$.

Слід зауважити, якщо б знадобилась ще більша точність оцінок – навряд чи цю оцінку можна було б отримати за прийнятний час на сучасному персональному комп'ютері. Для вирішення цієї проблеми автори пропонують реалізувати адаптивний ММК в рамках новітніх обчислювальних технологій – паралельні, розподілені обчислення та обчислення на графічному процесорі. Подібне ПЗ розробляється авторами.

Всі результати обчислень зведені в табл. 2, з якої витікає, що правильне значення розширеною невизначеності (p = 95%) складає $U = 4,0*10^{-6}$ См/м еталона ЕПР з приписаним значенням k = 0,0049741 См/м, що зберігається в ДП «Укрметртестстандарт».

Отже, встановлено, що, результат отриманий ДП «Укрметртестстандарт» на першій фазі оцінювання невизначеності було «загрублено» другою фазою – обчисленням. Цього слід уникати, оскільки основні витрати і технічні складності виникають саме при складанні моделі, дослідження джерел невизначеності, їх кількісного визначення.

Таблиця 2

Результати обчислень

Розрахунок	$U*10^{-6}$
ISO GUM	4,6 См/м
Адаптивний ММК $\Delta = 0,975*10^{-7}, p = 0,95$	4 См/м
Адаптивний ММК $\Delta = 0,999*10^{-8}, p = 0,95$	4,0 См/м
Адаптивний ММК $\Delta = 0,999*10^{-9}, p = 0,95$	4,00 См/м

Щоб ці витрати були виправданими необхідно застосовувати сучасні новітні методи обчислення невизначеності вимірювання приписаних значень еталонів – адаптивний ММК.

Висновки

В даній роботі розглянута актуальна задача – підвищення точності оцінок невизначеності результатів вимірювання приписаних значень національних еталонів фізичних величин.

Показано, що завдяки ряду припущень розрахунок невизначеності приписаних значень фізичних величин еталонів за ISO GUM призводить до неточних результатів.

Розроблений адаптивний ММК, що може гарантувати точність отримуваних оцінок та зменшує обчислювальну складність методу.

Метод апробовано прикладі оцінювання невизначеності приписаного значення національного еталону ЕПР. Доведено необхідність застосовувати адаптивний метод Монте-Карло для оцінювання невизначеності приписаних значень національних еталонів.

Список літератури

1. Захаров И.П. Оценивание точности измерений: состояние, проблемы, перспективы / И.П. Захаров // АСУ и приборы автоматики. – 2005. – Вып. 131. – С. 176-181.

2. Величко О.М. Невизначеність вимірювань: сучасний стан стан застосування / О.М. Величко // Укр. метролог. журнал. – 1999. – Вип. 4. – С. 5-9.

3. Cox M.G. The use of a Monte Carlo method for evaluating uncertainty and expanded uncertainty / M.G. Cox, B. Siebert. // Metrologia. – 2006. – Vol. 43. – P. 178-188.

4. Korc´zynski M.J. Convolution and uncertainty evaluation / M.J. Korc´zynski, M.G. Cox, P.M. Harris // Advanced Mathematical and Computational Tools in Metrology VII ed P Ciarlini et al Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences vol. 72 (New Jersey: World Scientific). – 2006. – P. 188-195.

5. JCGM 100:2008 Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement(GUM). – First edition 2008. – JCGM. – 2008. – 120 p.

6. JCGM 101:2008 Evaluation of measurement data — Supplement 1 to the ―Guide to the expression of uncertainty in measurement" — Propagation of distributions using a Monte Carlo method – First edition 2008. – JCGM. – 2008. – 82 p.

7. Новіков В.В. Інформаційні технології та оптимізація методів оцінювання точності результатів вимірювань з урахуванням концепції невизначеності / В.В. Новіков // Нові технології. – Кременчук, 2009. – Вип. 1 (23). – С. 101-114.

8. Goodwin Graham C. Dynamic System Identification: Experiment Design and Data Analysis / Graham C. Goodwin, Robert L. Payne. – Academic Press, 1977.

9. Захаров И.П. Применение метода Монте-Карло для реализации алгоритма статистической обработки результатов измерительного эксперимента / И.П. Захаров, Н.В. Штефан // Український метрологічний журнал. – 2004. – № 1. – С. 8-14.

10. Testing phase-shifting algorithms for uncertainty evaluation in interferometric gauge block calibration / V. Alvarez-Valado, H. Gonz´alez-Jorge and others // Metrologia. – 2009. – Vol. 46. – P. 637-645.

11. A Monte Carlo method for uncertainty evaluation implemented on a distributed computing system / T.J. Esward, P.M. Harris and others // Metrologia. – 2007. – Vol. 44. – P. 319-326.

12. Novikov V.V. Some considerations about validity of a Monte-Carlo method for evaluating measurement uncertainty / V.V. Novikov, Yu.A. Timoshenko // Системи обробки інформації: зб. наук. пр. – Х.: ХУ ПС, 2009. – Вип. 4 (78). – С. 47-50.

13. CCQM Electrochemical Analysis WG Pilot Comparison CCQM-P47. Electrolytic Conductivity at 0.05 and 0.005 S/m. Measurement Protocol, Kiev, UkrCSM – 2003.

Надійшла до редколегії 19.04.2010

Рецензент: д-р техн. наук, проф. І.П. Захаров, Харківський національний университет радіоелектроніки, Харків.

ВЫЧИСЛЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ПРИПИСАННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН НАЦИОНАЛЬНЫХ ЭТАЛОНОВ ПО АДАПТИВНОМУ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

В.В. Новиков

В статье рассмотрена задача оценивания неопределенности приписаннях значений физических величи национальных эталонов. Для повышения точности второй фазы оценивания(вычисление) этой задачи предложено применять адаптивный метод Монте-Карло, который показал высокую эффективность для оценивания неопределенности результатов измерений. Эффективность метода доказана на примере оценивания неопределенности приписаного значение національного электролитической проводимости жидкости.

Ключевые слова: *неопределенность измерения, метод Монте-Карло, адаптивность, эталон.*

ESTIMATES OF NATIONAL STANDARDS' PHYSICAL VALUES UNCERTAINTY CALCULATION USING ADAPTIVE MONTE-CARLO METHOD

V.V. Novikov

Paper discusses the task of uncertainty evaluation of estimated physical values of national standards. In order to improve accuracy of the second phase of evaluation (calculation) of this task adaptive Monte-Carlo method is proposed for use. The latter showed high effectiveness for uncertainty evaluation of measurements results. By the example of uncertainty evaluation of estimated value of electrolytic conductivity of fluids national standard, effectiveness of the proposed method is proved.

Keywords: *uncertainty in measurement, Monte-Carlo method, apaptivity, standard, electrolytical conductivity.*