INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Výpočet nejistot metodou Monte carlo

Mgr. Martin Šíra, Ph.D. (ČMI, Brno)

červen 2012

Tato prezentace je spolufinancována Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Výpočty nejistot

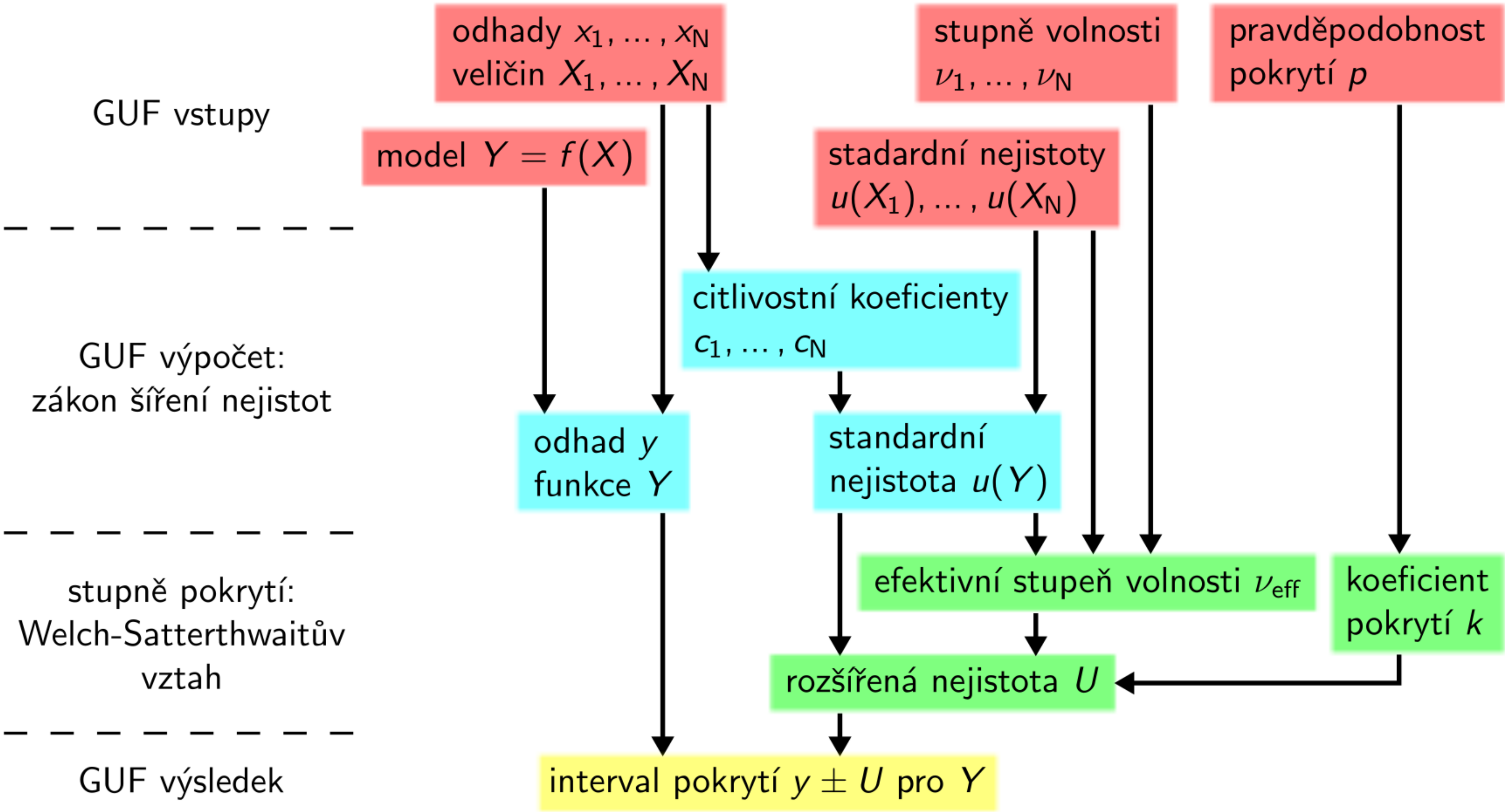
V metrologii jsou převážně používány dvě metody:

- GUM Uncertainty Framework (GUF)
  dokument **Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement** (GUM), 1995

- Metoda Monte Carlo
  dokument **Evaluation of measurement dat – Suplement 1 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement"– Propagation of distributions using a Monte Carlo method**, 2008

dokumenty online
`http://www.bipm.org/en/publications/guides/gum.html`

schéma metody GUF



vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6$, ...

vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6$, ...
- citlivostní koeficienty: $c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. $u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i)$. $\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j)$

vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6, \ldots$
- citlivostní koeficienty: $c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. $u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i)$.
  $\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j)$
- korelované vstupní veličiny: $2 \sum_i \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j)$

vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6$, ...
- citlivostní koeficienty: $c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. $u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i)$. $\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j)$
- korelované vstupní veličiny: $2 \sum_i \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j)$
- efektivní stupeň volnosti: $\nu_{\mathrm{eff}} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_i \frac{u_i^4(y)}{\nu_i}}$

vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6$, ...
- citlivostní koeficienty: $c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. $u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i)$. $\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j)$
- korelované vstupní veličiny: $2 \sum_i \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j)$
- efektivní stupeň volnosti: $\nu_{\mathrm{eff}} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_i \frac{u_i^4(y)}{\nu_i}}$
- koeficient pokrytí: $1 - \alpha = \int_{-\inf}^{t_{1-\alpha}} f(t, \nu_{\mathrm{eff}}) \mathrm{d}t$, $k = t_p$, $p = 1 - 2\alpha$

vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6$, ...
- citlivostní koeficienty: $c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. $u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i)$. $\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j)$
- korelované vstupní veličiny: $2 \sum_i \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j)$
- efektivní stupeň volnosti: $\nu_{\mathrm{eff}} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_i \frac{u_i^4(y)}{\nu_i}}$
- koeficient pokrytí: $1 - \alpha = \int_{-\inf}^{t_{1-\alpha}} f(t, \nu_{\mathrm{eff}}) \mathrm{d}t$, $k = t_p$, $p = 1 - 2\alpha$
- rozšířená nejistota: $U = k u_c(y)$, $Y - U \leq Y' \geq Y + U$

vzorce v metodě GUF

- standardní nejistoty: $u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)}\sum_i (q_i - \overline{q})^2$, $u^2(x_i) = a^2/3$, $u^2(x_i) = a^2/6$, ...
- citlivostní koeficienty: $c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$. $u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i)$.
  $$\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j)$$
- korelované vstupní veličiny: $2 \sum_i \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j)$
- efektivní stupeň volnosti: $\nu_{\mathrm{eff}} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_i \frac{u_i^4(y)}{\nu_i}}$
- koeficient pokrytí: $1 - \alpha = \int_{-\inf}^{t_{1-\alpha}} f(t, \nu_{\mathrm{eff}}) \mathrm{d}t$, $k = t_p$, $p = 1 - 2\alpha$
- rozšířená nejistota: $U = k u_c(y)$, $Y - U \leq Y' \geq Y + U$

KOMPLIKOVANÉ(?)

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic
  - počítání určitých integrálů

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic
  - počítání určitých integrálů
  - simulace experimentů, převážně:

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic
  - počítání určitých integrálů
  - simulace experimentů, převážně:
    - štěpné reakce

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic
  - počítání určitých integrálů
  - simulace experimentů, převážně:
    - štěpné reakce
    - difuze plynů

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic
  - počítání určitých integrálů
  - simulace experimentů, převážně:
    - štěpné reakce
    - difuze plynů
    - proudění tekutin

Metoda Monte Carlo

- třída algorimtů pro simulaci systémů
- opakované náhodné vzorkování pro simulaci náhodných dějů
- využití:
  - řešení diferenciálních rovnic
  - počítání určitých integrálů
  - simulace experimentů, převážně:
    - štěpné reakce
    - difuze plynů
    - proudění tekutin
  - **výpočet nejistot**

historie MMC

- vyvinuli John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis 1940 v Los Alamos během vývoje atomové bomby

historie MMC

- vyvinuli John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis 1940 v Los Alamos během vývoje atomové bomby
- Ulam měl myšlenku používání náhodných čísel

historie MMC

- vyvinuli John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis 1940 v Los Alamos během vývoje atomové bomby
- Ulam měl myšlenku používání náhodných čísel
- von Neumann použil generování náhodných čísel místo seznamu náhodných čísel

historie MMC

- vyvinuli John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis 1940 v Los Alamos během vývoje atomové bomby
- Ulam měl myšlenku používání náhodných čísel
- von Neumann použil generování náhodných čísel místo seznamu náhodných čísel
- Metropolis vypracoval algorithmy

historie MMC

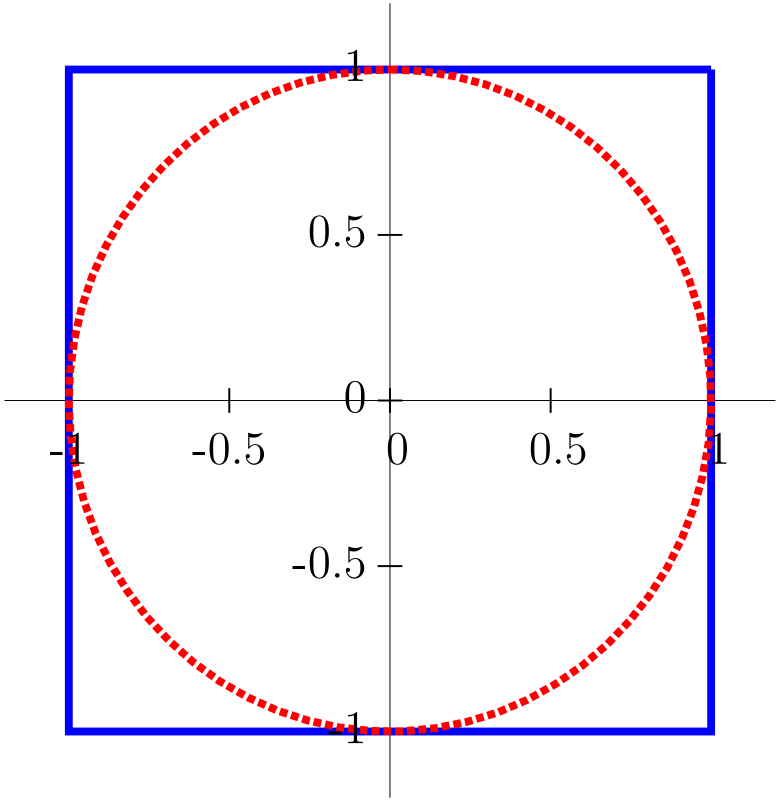
- vyvinuli John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis 1940 v Los Alamos během vývoje atomové bomby
- Ulam měl myšlenku používání náhodných čísel
- von Neumann použil generování náhodných čísel místo seznamu náhodných čísel
- Metropolis vypracoval algorithmy
- pojmenováno po městě Monte Carlo, kde Ulamův strýc často prohrálval v kasinu

Monte Carlo, Monako

Autor fotografie: Joseph Plotz

Příklad použití MMC

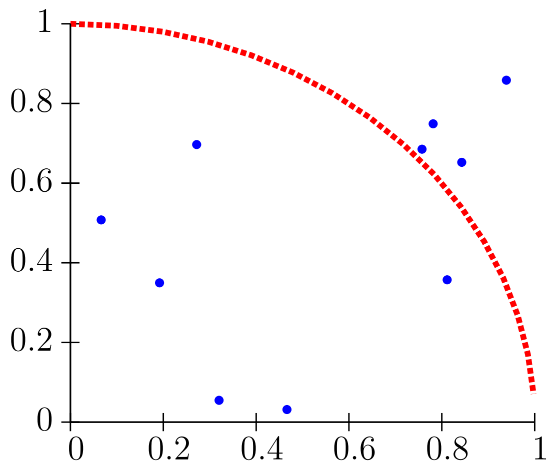
Výpočet Ludolfova čísla: $\pi = 3,14159\ldots$



Obsah kruhu:	$S_1 = \pi r^2$
Obsah čtverce:	$S_2 = r^2$
Počet bodů:	N
Počet bodů v kruhu:	M

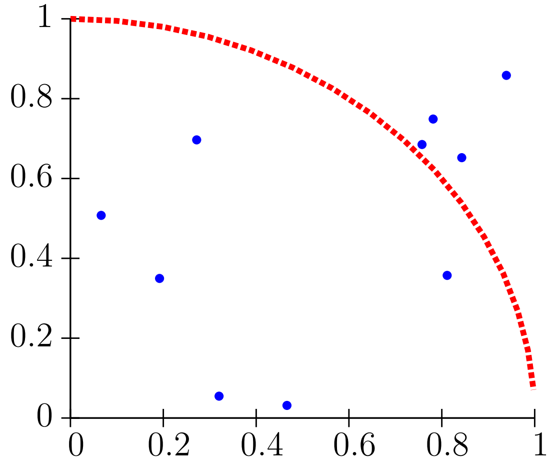
$$\frac{S_1}{S_2} = \frac{\pi r^2}{r^2} = \frac{M}{N} \Rightarrow \pi = \frac{M}{N}$$

Průběh výpočtu π

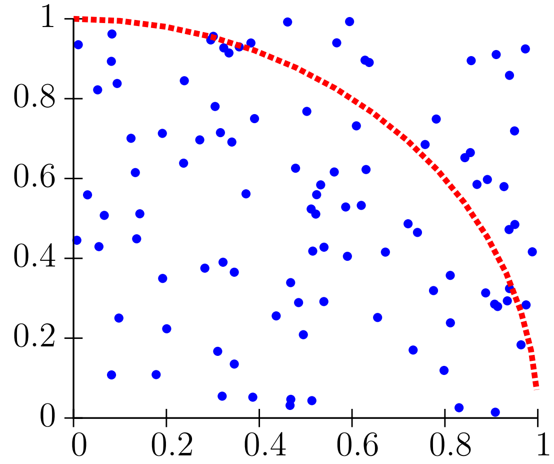
10: 

Průběh výpočtu π

10:

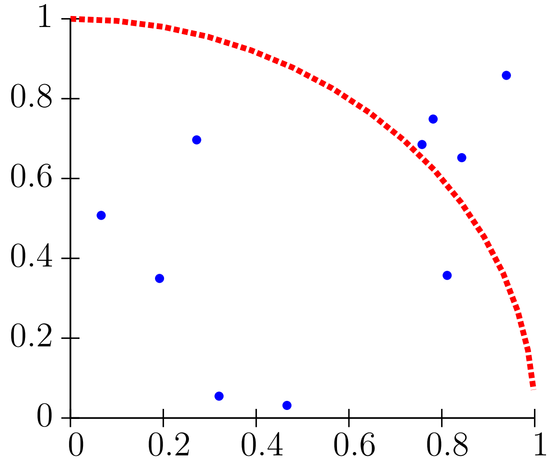


100:

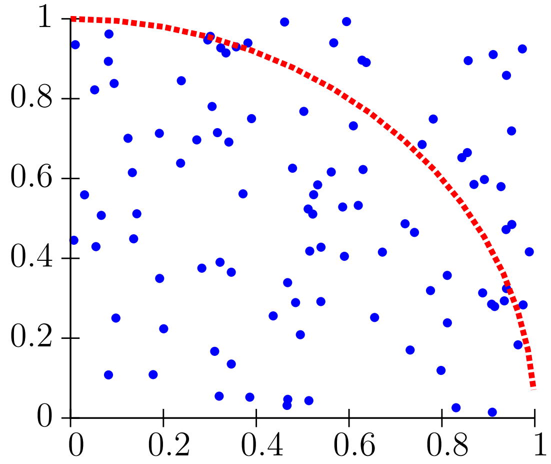


Průběh výpočtu π

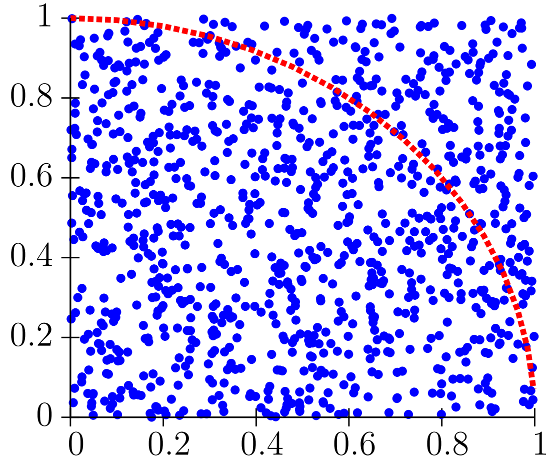
10:



100:

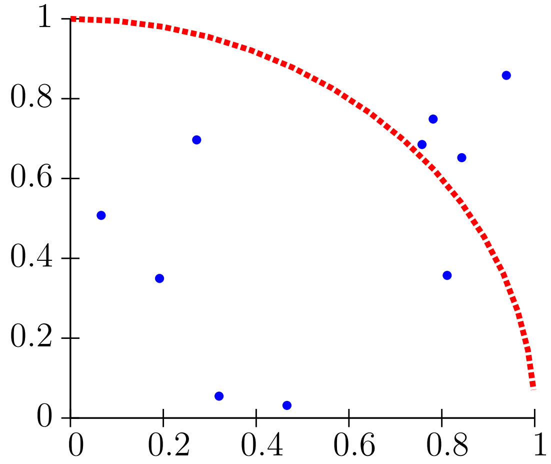


1000:

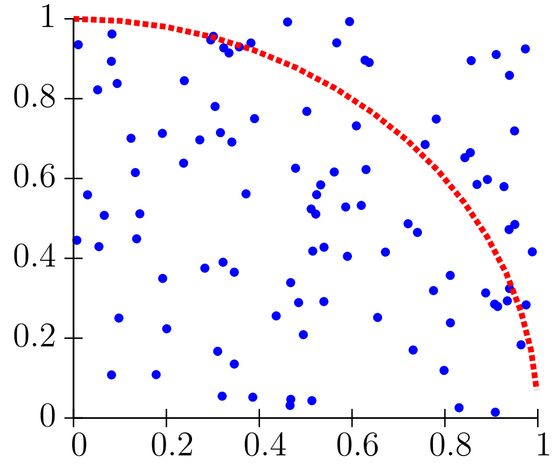


Průběh výpočtu π

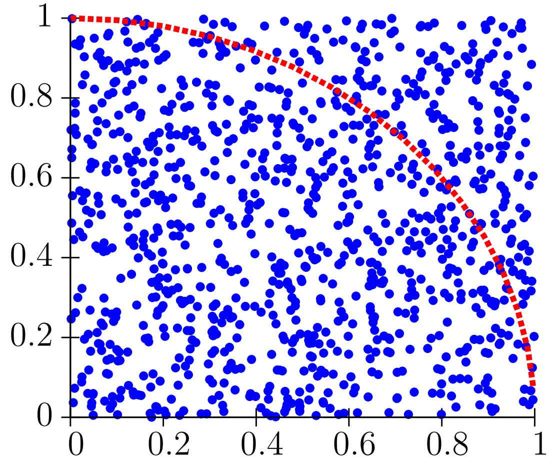
10:



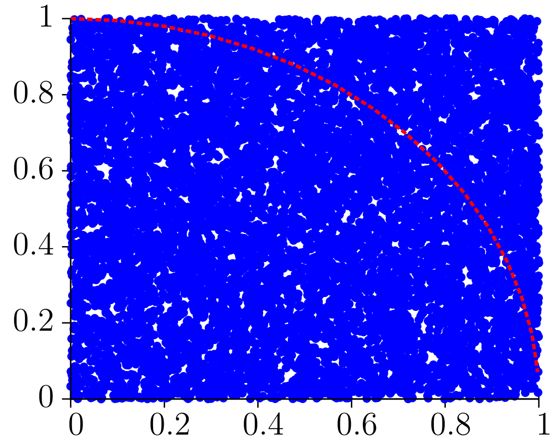
100:



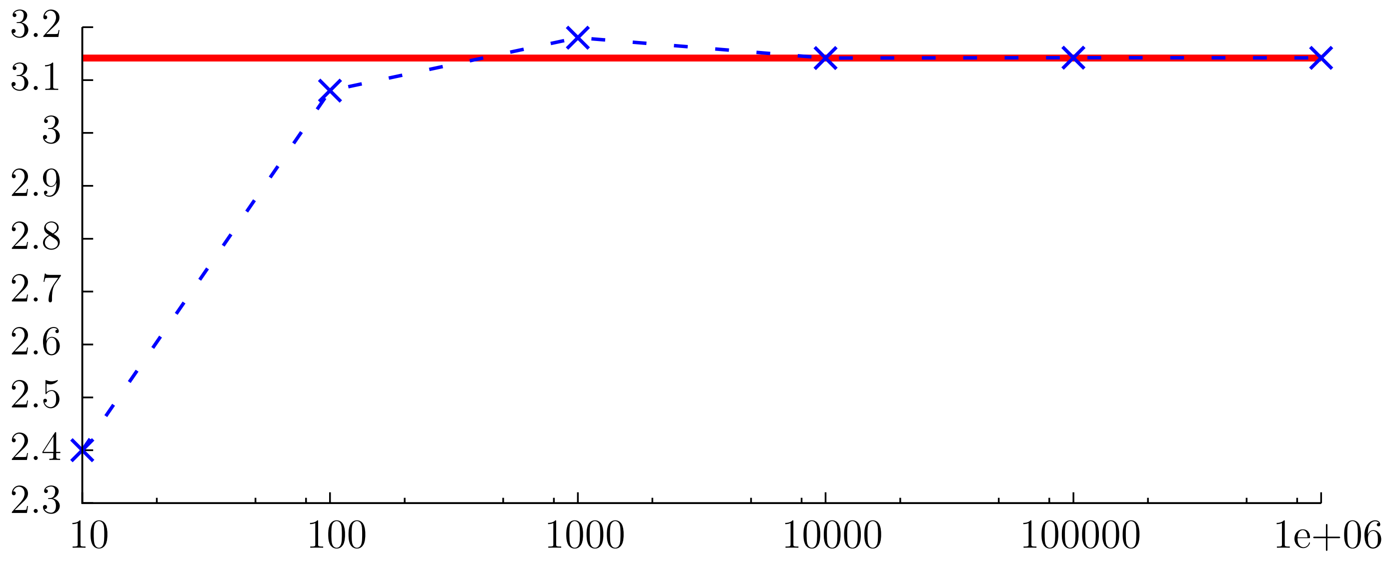
1000:



10000:



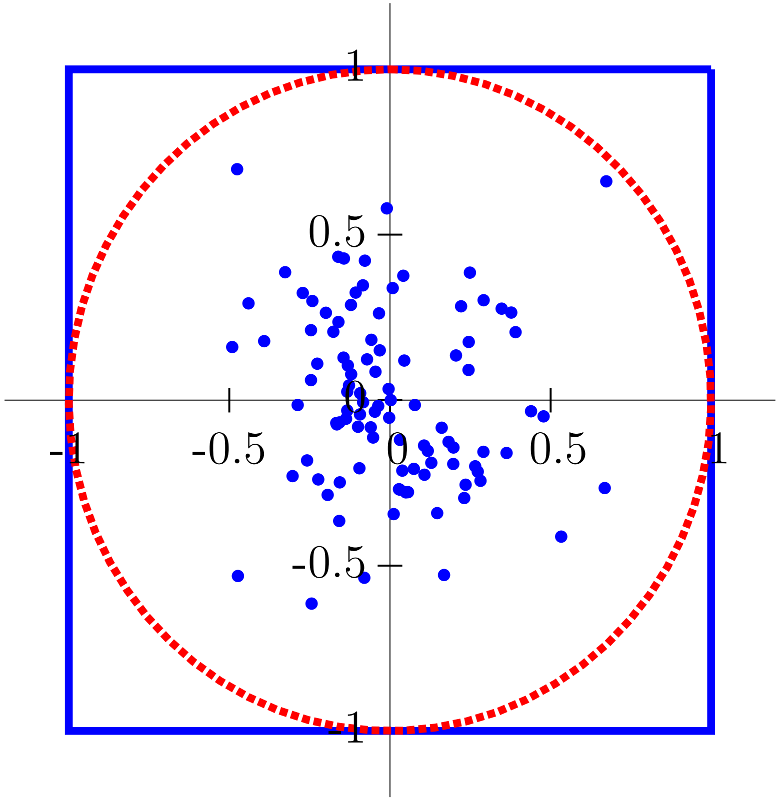
Výsledek výpočtu π MMC



Zvýšením řádu opakování získáme obvykle jednu cifru π.

(Moderní iterační metody přidají 5 cifer π každým výpočetním krokem.)

Čísla musí být náhodná

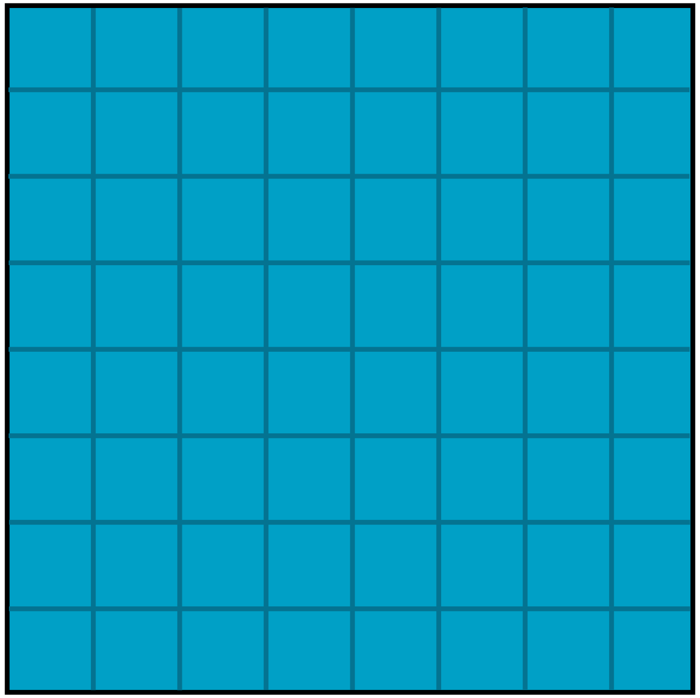


$$\pi \neq \frac{100}{100} = 1$$

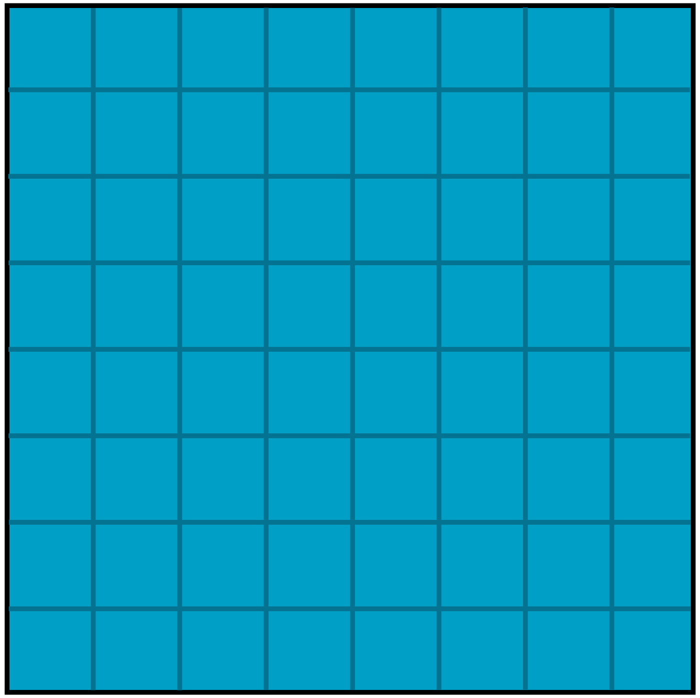
Proč ne pravidelné rozložení čísel?

Hra lodě:

hrací pole:



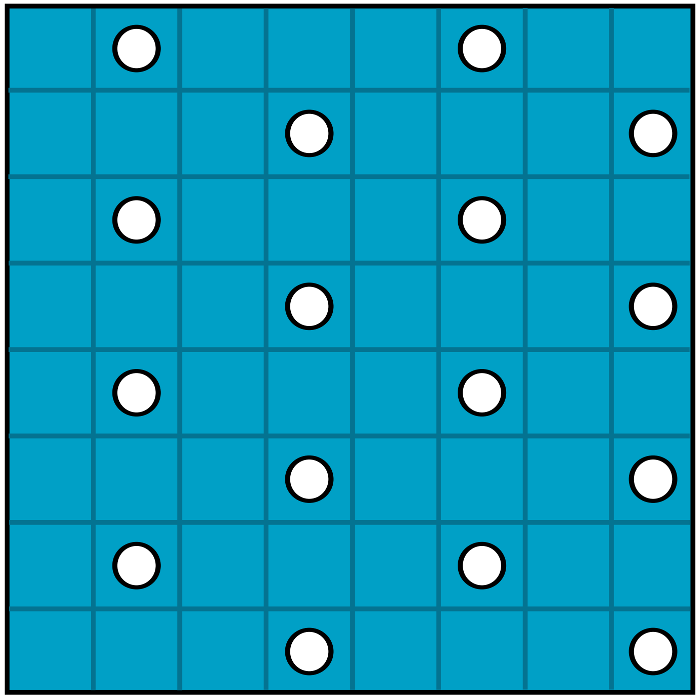
hrací pole:



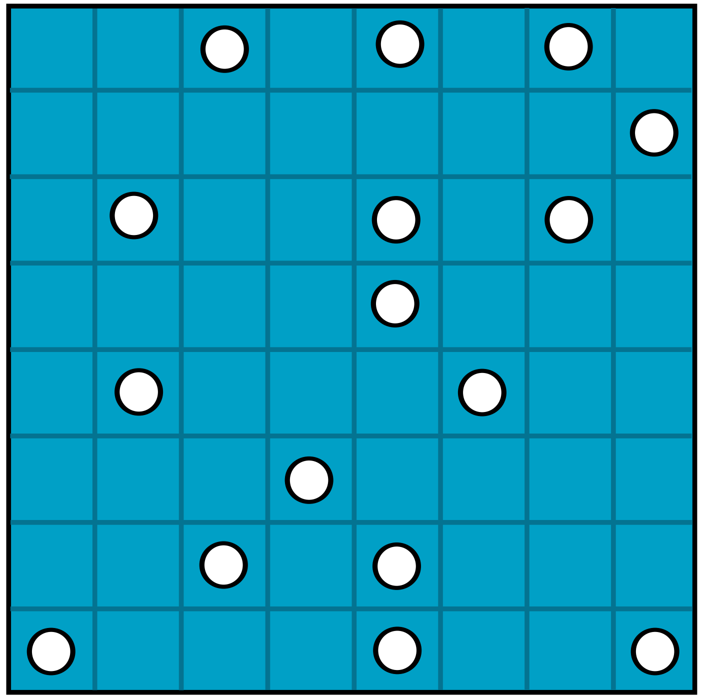
Proč ne pravidelné rozložení čísel?

Hra lodě:

pravidená střelba:



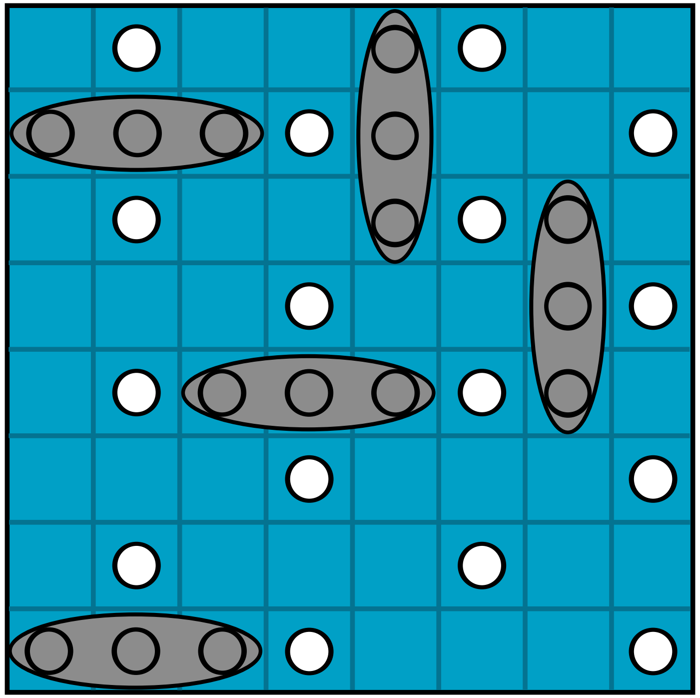
náhodná střelba:



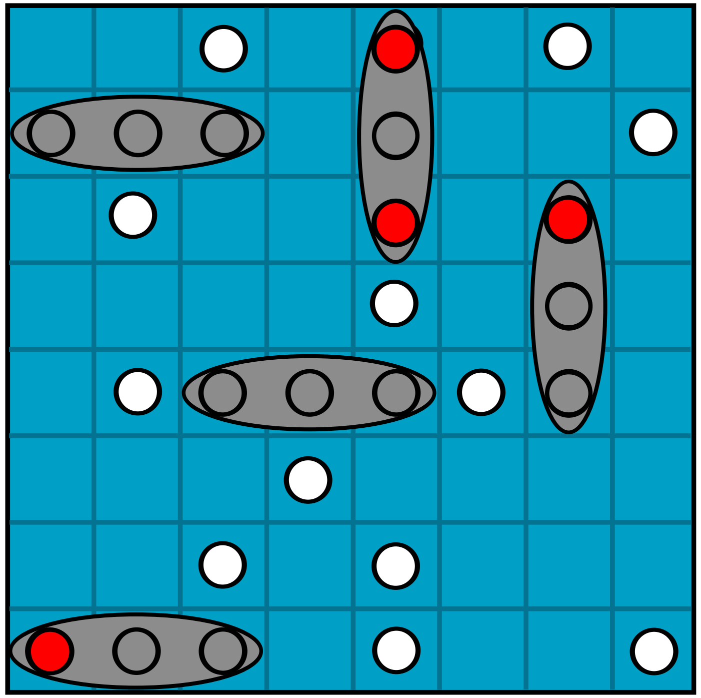
Proč ne pravidelné rozložení čísel?

Hra lodě:

žádný zásah



čtyři zásahy!



Nejistoty metodou Monte Carlo

Postup:

- vytvoření matematického modelu děje

Nejistoty metodou Monte Carlo

Postup:

- vytvoření matematického modelu děje
- určení hustot pravděpodobnosti vstupních veličin

Nejistoty metodou Monte Carlo

Postup:

- vytvoření matematického modelu děje
- určení hustot pravděpodobnosti vstupních veličin
- provedení dostatečného počtu simulací

Nejistoty metodou Monte Carlo

Postup:

- vytvoření matematického modelu děje
- určení hustot pravděpodobnosti vstupních veličin
- provedení dostatečného počtu simulací
- zpracování výpočetních hodnot stochastickými metodami

Nejistoty metodou Monte Carlo

Postup:

- vytvoření matematického modelu děje
- určení hustot pravděpodobnosti vstupních veličin
- provedení dostatečného počtu simulací
- zpracování výpočetních hodnot stochastickými metodami
- určení nejpravděpodobnější hodnoty a nejistoty

Jednoduchý příklad

matematický model: $Y = A + B$

Jednoduchý příklad

matematický model: $Y = A + B$

hodnoty: $A = B = 0.5$

Jednoduchý příklad

matematický model: $Y = A + B$

hodnoty: $A = B = 0.5$

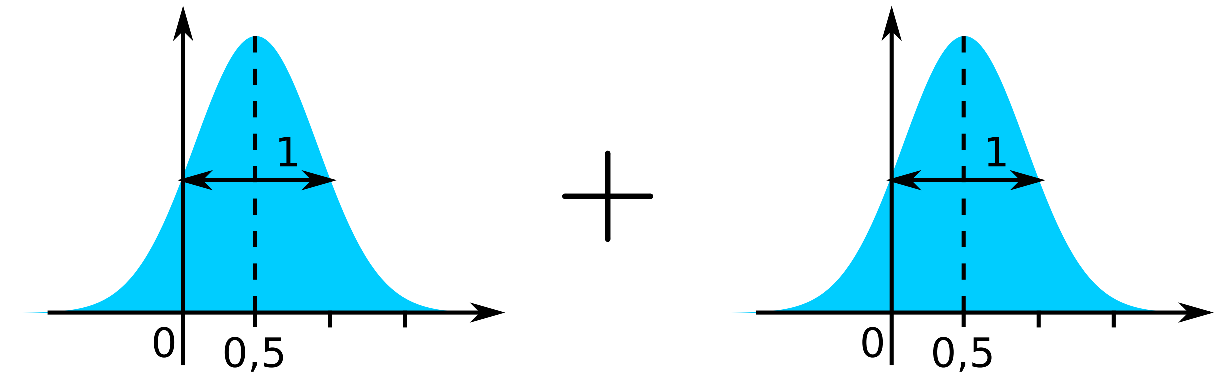
nejistoty: $u(A) = u(B) = 0.5$, normální rozdělení

Jednoduchý příklad

matematický model: $Y = A + B$

hodnoty: $A = B = 0.5$

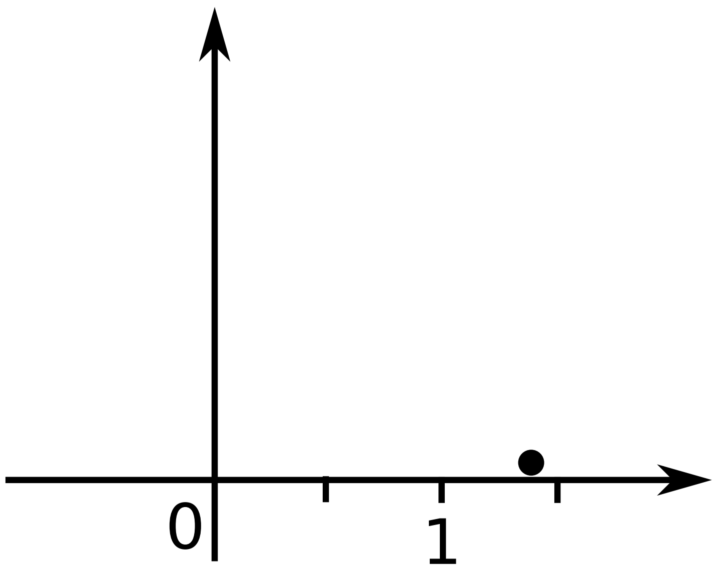
nejistoty: $u(A) = u(B) = 0.5$, normální rozdělení

$Y =$ 

Jednoduchý příklad – výpočet

$$\color{red}{1}, \begin{array}{l} A_1 = 0,8 \\ B_1 = 0,5 \end{array} \Rightarrow Y = 1,3$$

Histogram:

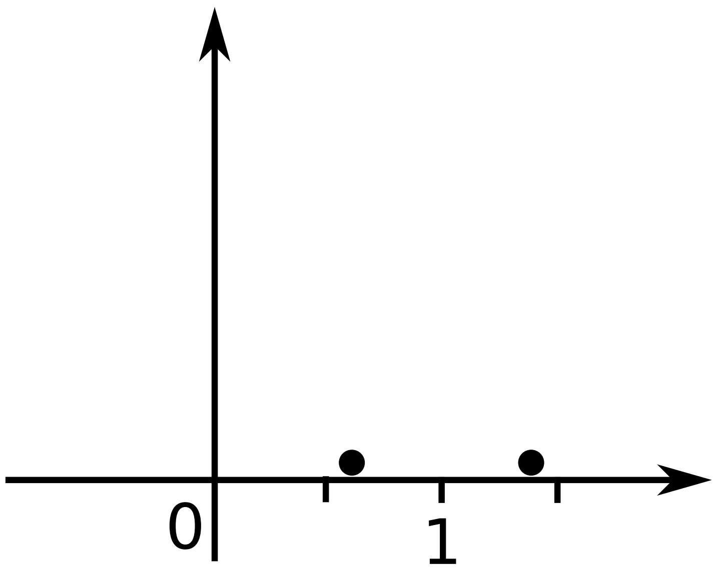


Jednoduchý příklad – výpočet

$$1, \quad \begin{matrix} A_1 = 0,8 \\ B_1 = 0,5 \end{matrix} \Rightarrow Y = 1,3$$

$$2, \quad \begin{matrix} A_2 = 0,34 \\ B_2 = 0,1 \end{matrix} \Rightarrow Y = 0,54$$

Histogram:



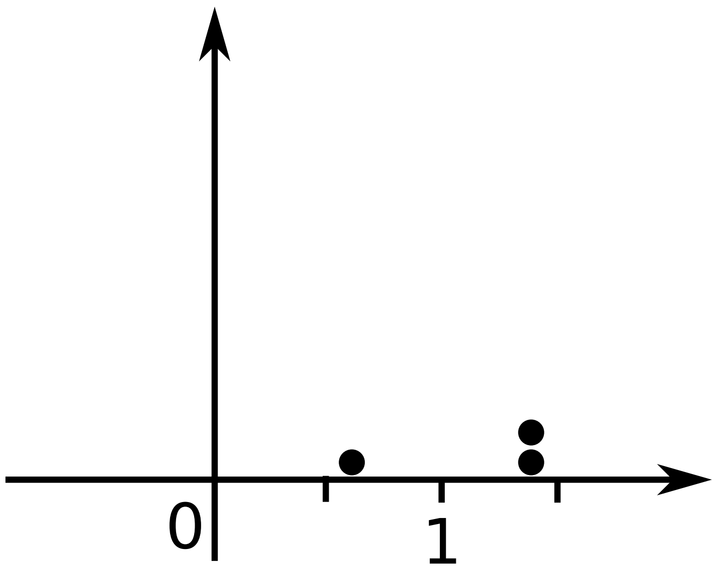
Jednoduchý příklad – výpočet

1, $\begin{matrix} A_1 = 0,8 \\ B_1 = 0,5 \end{matrix} \Rightarrow Y = 1,3$

2, $\begin{matrix} A_2 = 0,34 \\ B_2 = 0,1 \end{matrix} \Rightarrow Y = 0,54$

3, $\begin{matrix} A_3 = 0,07 \\ B_3 = 1,23 \end{matrix} \Rightarrow Y = 1,3$

Histogram:



Jednoduchý příklad – výpočet

$$1,\quad \begin{matrix} A_1 = 0,8 \\ B_1 = 0,5 \end{matrix} \Rightarrow Y = 1,3$$

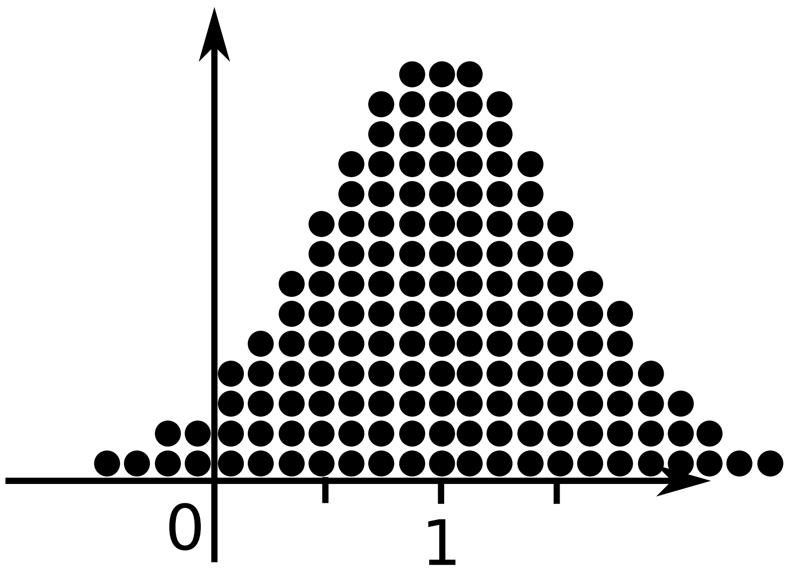
$$2,\quad \begin{matrix} A_2 = 0,34 \\ B_2 = 0,1 \end{matrix} \Rightarrow Y = 0,54$$

$$3,\quad \begin{matrix} A_3 = 0,07 \\ B_3 = 1,23 \end{matrix} \Rightarrow Y = 1,3$$

$$\dots$$

$$10^6,\quad \begin{matrix} A_{10^6} = 0,11 \\ B_{10^6} = 0,42 \end{matrix} \Rightarrow Y_{10^6} = 0,52$$

Histogram:



Jednoduchý příklad – výpočet

$$1,\quad \begin{array}{l} A_1 = 0,8 \\ B_1 = 0,5 \end{array} \Rightarrow Y = 1,3$$

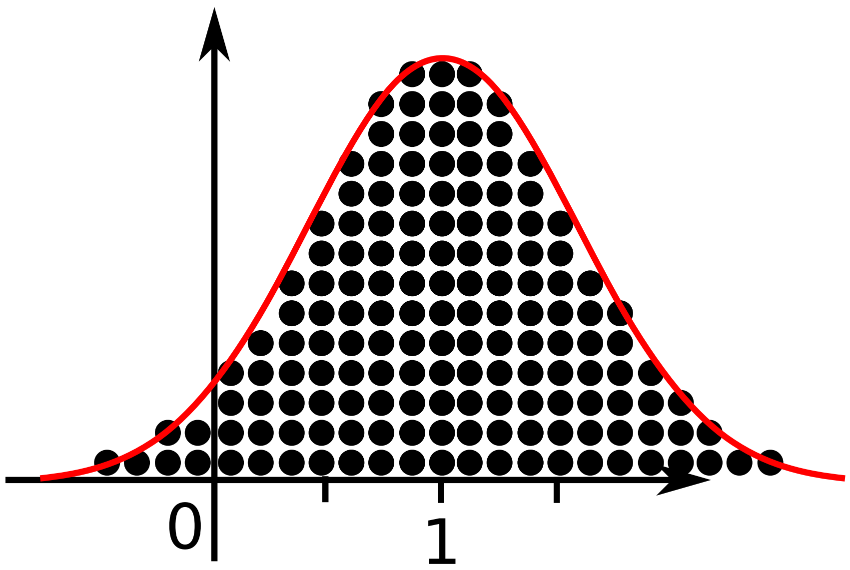
$$2,\quad \begin{array}{l} A_2 = 0,34 \\ B_2 = 0,1 \end{array} \Rightarrow Y = 0,54$$

$$3,\quad \begin{array}{l} A_3 = 0,07 \\ B_3 = 1,23 \end{array} \Rightarrow Y = 1,3$$

$$\ldots$$

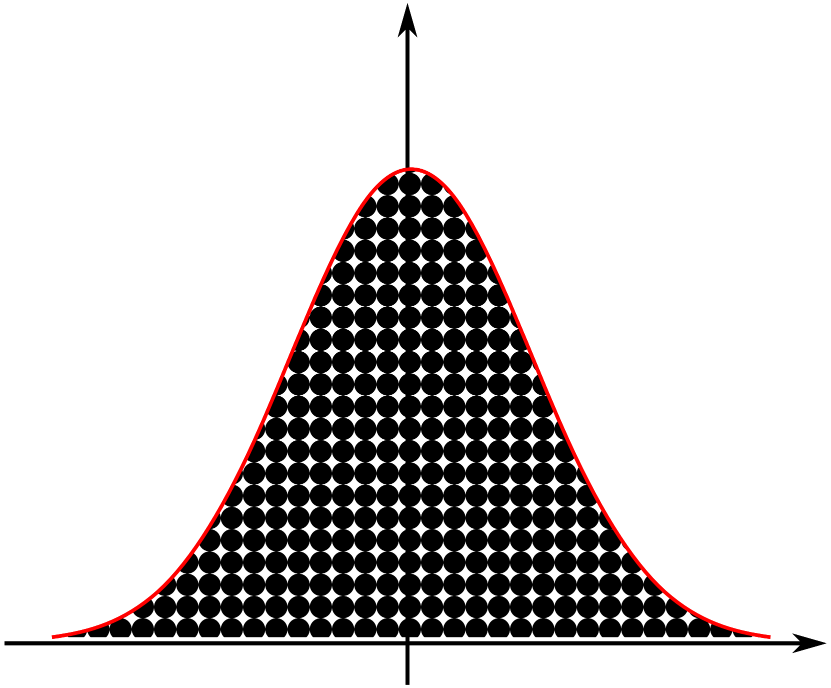
$$10^6,\quad \begin{array}{l} A_{10^6} = 0,11 \\ B_{10^6} = 0,42 \end{array} \Rightarrow Y_{10^6} = 0,52$$

Histogram:



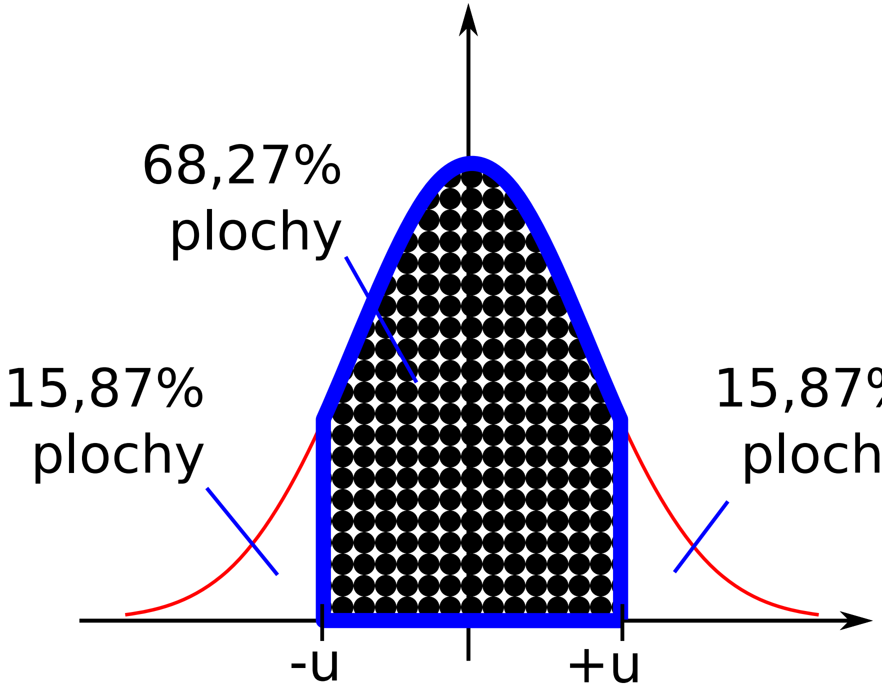
Určení nejistoty

Nejistota: pravá hodnota Y se nachází v daném intervalu s nejistotou p.
Určení nejistoty odpovídá nalezení plochy pod křivkou odpovídající p z celkové plochy křivky.



Určení nejistoty

Nejistota: pravá hodnota Y se nachází v daném intervalu s nejistotou p.
Určení nejistoty odpovídá nalezení plochy pod křivkou odpovídající p z celkové plochy křivky.



Určení nejistoty

Nejistota: pravá hodnota Y se nachází v daném intervalu s nejistotou p.
Určení nejistoty odpovídá nalezení plochy pod křivkou odpovídající p z celkové plochy křivky.

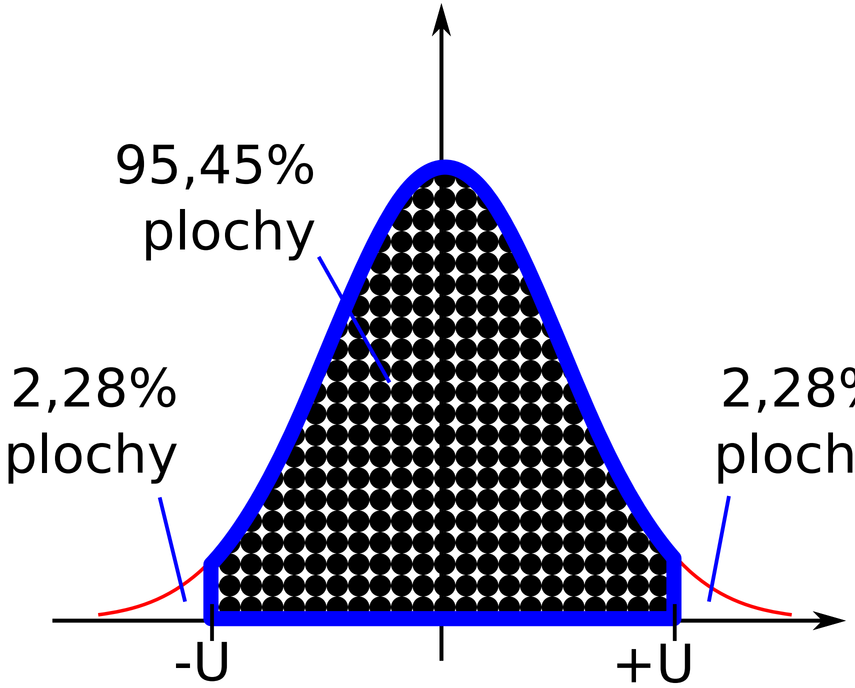
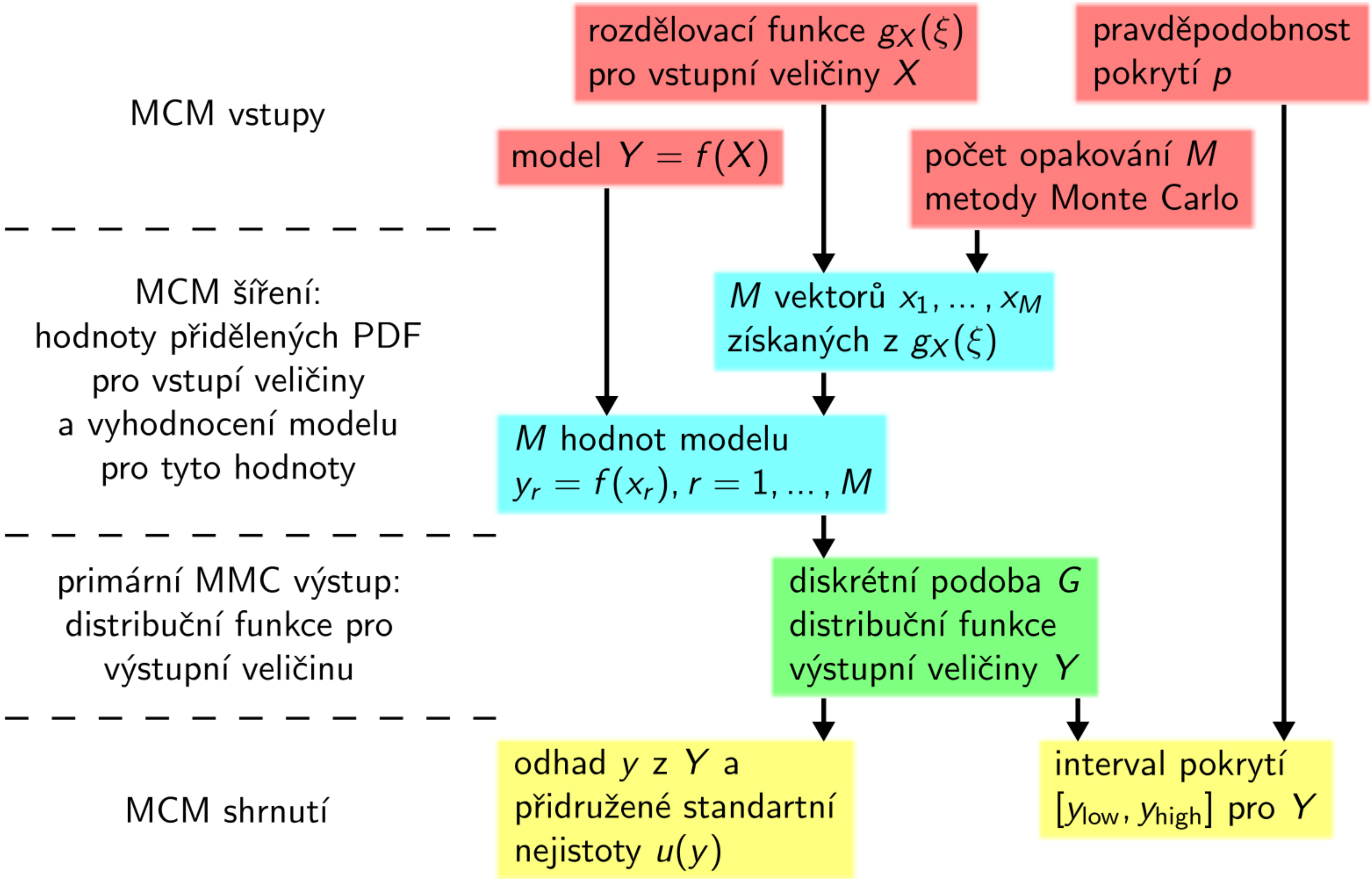
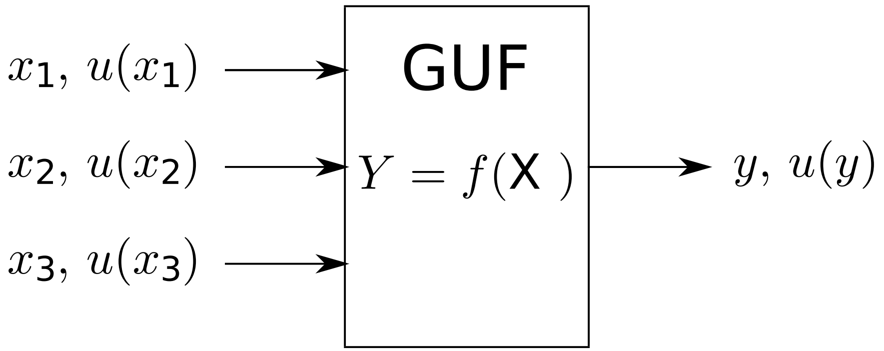
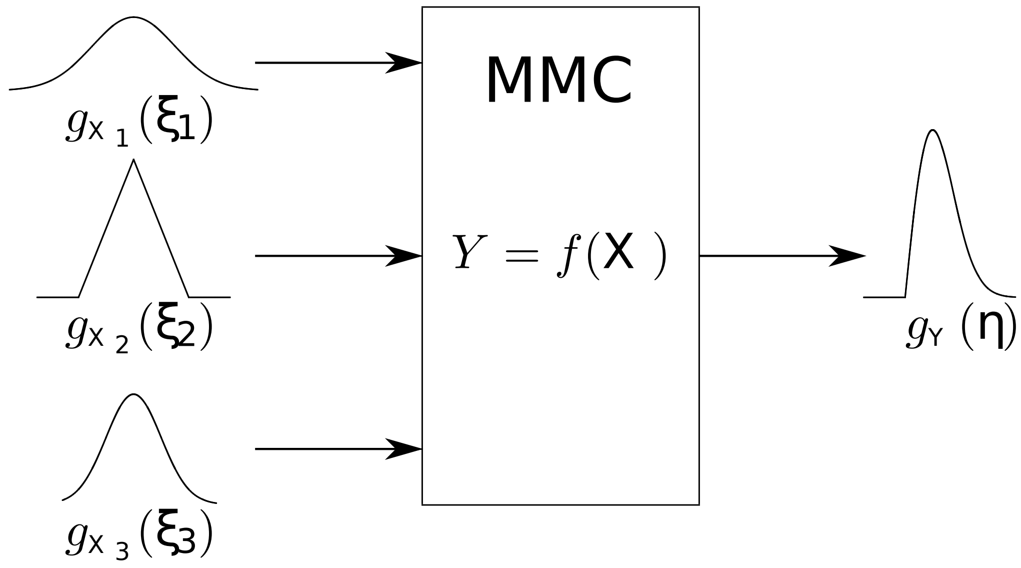


schéma metody Monte Carlo



GUF vs MMC


$x_1,\ u(x_1)$
$x_2,\ u(x_2)$
$x_3,\ u(x_3)$
GUF
$Y = f(\mathsf{X})$
$y,\ u(y)$


$g_{X_1}(\xi_1)$
$g_{X_2}(\xi_2)$
$g_{X_3}(\xi_3)$
MMC
$Y = f(\mathsf{X})$
$g_Y(\eta)$

výhody a nevýhody MMC

Lze počítat i s kompikovanými rozděleními
a komplexními čísly.

výhody a nevýhody MMC

Lze počítat i s kompikovanými rozděleními a komplexními čísly.

Je třeba mít generátor náhodných čísel a vhodný software.

výhody a nevýhody MMC

Lze počítat i s kompikovanými rozděleními a komplexními čísly.

Je třeba mít generátor náhodných čísel a vhodný software.

Není třeba derivovat.

výhody a nevýhody MMC

Lze počítat i s kompikovanými rozděleními a komplexními čísly.

Je třeba mít generátor náhodných čísel a vhodný software.

Není třeba derivovat.

Nelze počítat na papíře.

výhody a nevýhody MMC

Lze počítat i s kompikovanými rozděleními a komplexními čísly.

Je třeba mít generátor náhodných čísel a vhodný software.

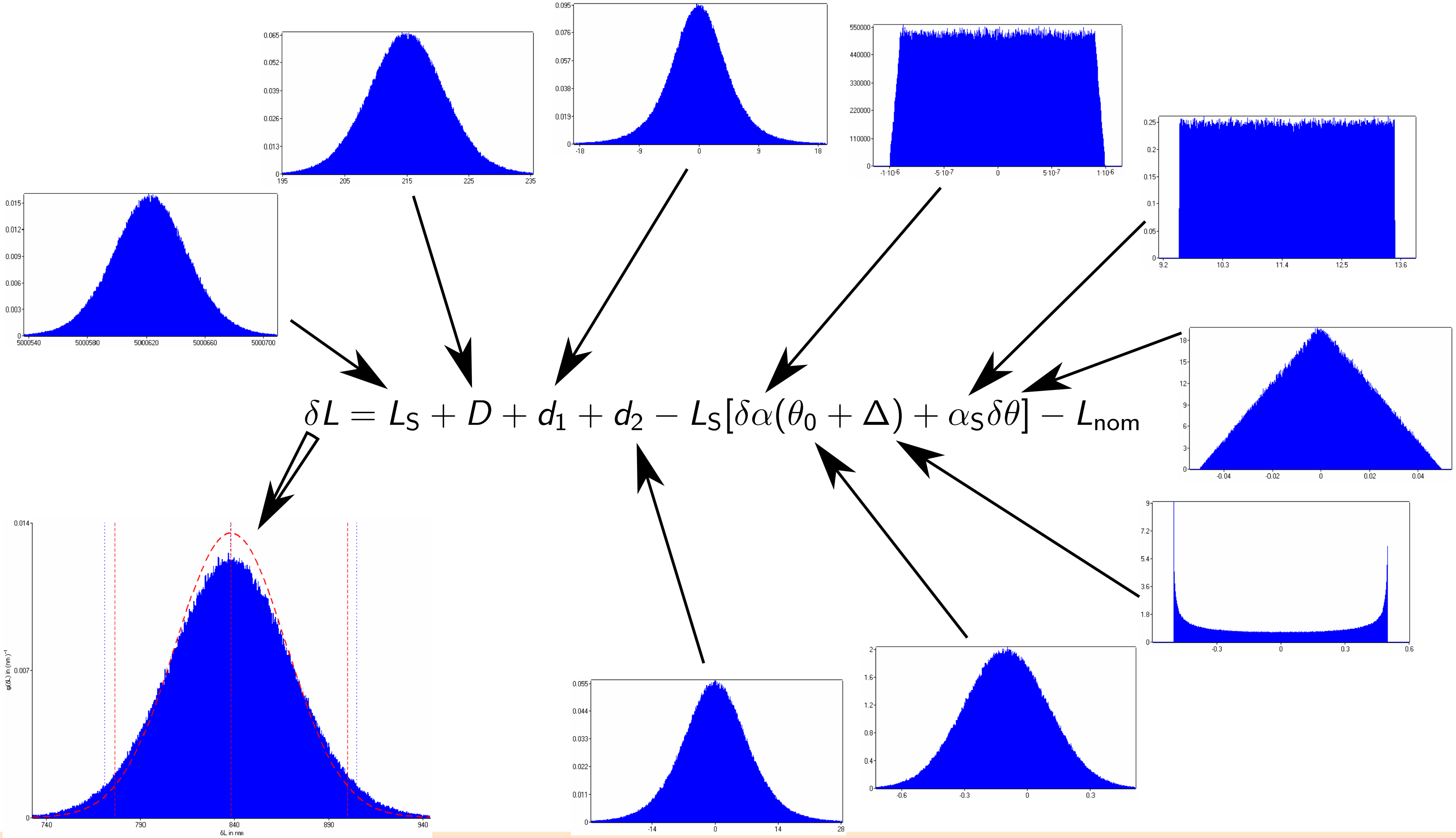
Není třeba derivovat.

Nelze počítat na papíře.

Není třeba odhadovat a počítat stupně volnosti.

složitý příklad – ukázka chyby GUF

Guide to the Expression of Uncertainty in Measurements, Annex H, příklad koncových měrek:



$$\delta L = L_S + D + d_1 + d_2 - L_S[\delta\alpha(\theta_0 + \Delta) + \alpha_S \delta\theta] - L_{nom}$$

složitý příklad – ukázka chyby GUF

Guide to the Expression of Uncertainty in Measurements,
Annex H
příklad koncových měrek

GUF:
$\delta L = (838 \pm 62)\,\mathrm{nm},\ k = 2,$ t-rozdělení, $p = 95,45\%$

složitý příklad – ukázka chyby GUF

Guide to the Expression of Uncertainty in Measurements, Annex H
příklad koncových měrek

GUF:
$\delta L = (838 \pm 62)\,\mathrm{nm},\ k = 2,$ t-rozdělení, $p = 95,45\%$

MMC:
$\delta L = (838 \pm 6\mathbf{7})\,\mathrm{nm},\ p = 95,45\%,\ 53 \times 10^4$ opakování

kdy použít MMC?

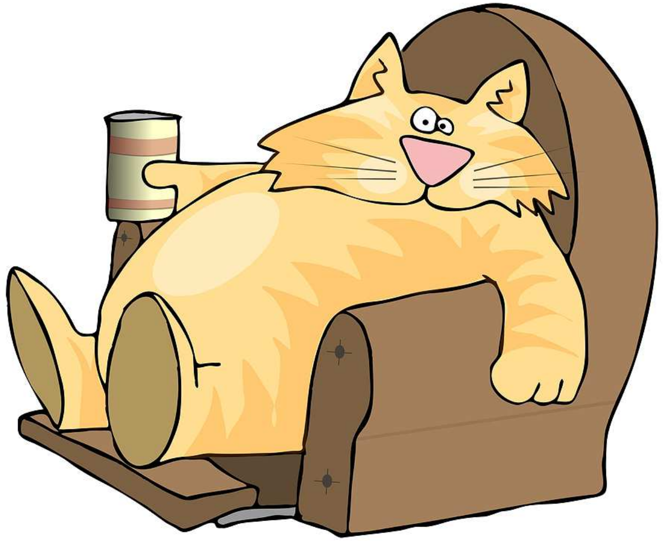
- když vstupní veličiy mají "divoká rozdělení"

kdy použít MMC?

- když vstupní veličiy mají "divoká rozdělení"
- když citlivostní koeficienty jsou nulové

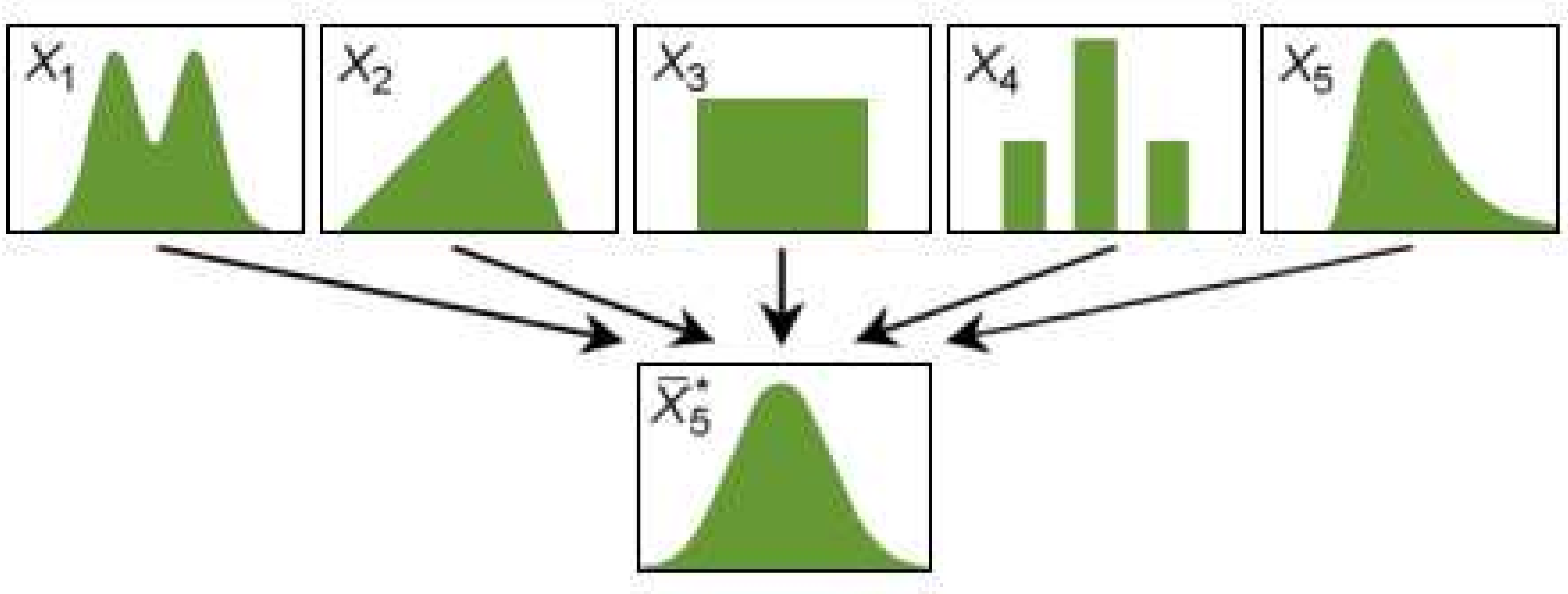
kdy použít MMC?

- když vstupní veličiy mají "divoká rozdělení"
- když citlivostní koeficienty jsou nulové
- když zvítězí lenost derivovat



Centrální limitní věta

Velké množství libovolných vstupních rozdělení dá výsledné normální rozdělení.



Obecné programy:

Matlab ($), Octave, R, . . .

software pro MMC

Obecné programy:
Matlab ($), Octave, R, ...

Specializované programy:
Gum Workbench Pro, Qualisyst QMSys GUM Professinal, OpenBugs.

software pro MMC

Obecné programy:
Matlab ($), Octave, R, . . .

Specializované programy:
Gum Workbench Pro, Qualisyst QMSys GUM Professinal, OpenBugs.

Nevhodné programy:
Excel 2000, 2003, skriptovací jazyk VBA v Excelu 2007, (Excel 2010?)

Děkuji

za pozornost