

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Výpočet nejistot metodou Monte carlo

Učební texty k semináři

Autoři:

Mgr. Martin Šíra, Ph.D. (Český Metrologický Institut)

Datum:

červen 2012

Centrum pro rozvoj výzkumu pokročilých řídicích a senzorických technologií
CZ.1.07/2.3.00/09.0031

TENTO STUDIJNÍ MATERIÁL JE SPOLUFINANCOVÁN EVROPSKÝM SOCIÁLNÍM
FONDEM A STÁTNÍM ROZPOČTEM ČESKÉ REPUBLIKY

Obsah

1	Metody výpočtu nejistot	3
2	Metoda GUF	4
3	Metoda Monte Carlo	7
4	Výpočet nejistot MMC	9
5	Srovnání GUF a MMC	11
6	Software pro MMC	12

Metody výpočtu nejistot

V metrologii jsou převážně používány dvě metody výpočtu nejistot:

- GUM Uncertainty Framework (GUF), popsaná v dokumentu *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM)*, 1995
- Metoda Monte Carlo (MMC), popsaná v 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*, 2008

Tyto dokumenty jsou dostupné online na stránkách Bureau international des poids et mesures (BIPM):

<http://www.bipm.org/en/publications/guides/gum.html>

Tato metoda vychází z klasického přístupu výpočtu chyb, a je upravena pro definici a pojmosloví nejistot. Metoda používá pojem standardní nejistota, která není závislá na původu. To znamená, že nejistoty získané vzorkováním náhodné veličiny nebo jiným způsobem jsou rovnocenné. Nejprve je třeba znát model měření ve tvaru

$$y = f(x_1, \dots, x_N), \quad (2.1)$$

kde y je hledaná veličina a x_i jsou vstupní (měřené nebo jinak zjištěné) veličiny. Pomocí modelu měření a zákona šíření nejistoty jsou vypočteny citlivostní koeficienty, odhad hledané veličiny a standardní nejistota hledané veličiny.

Aby bylo možné použít metodu GUF, je třeba znát minimálně následující vzorce:

1. Výpočet standardní nejistoty $u(x_i)$ (tzv. typu A) vzorkováním náhodné veličiny:

$$u^2(x_i) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_i (q_i - \bar{q})^2, \quad (2.2)$$

kde n je počet vzorků a q jsou hodnoty vzorků.

2. Výpočet standardní nejistoty z předpokládaných rozdělání (tzv. typu B). Například pokud předpokládáme rovnoměrné rozdělání náhodné veličiny, standardní nejistota je rovna:

$$u^2(x_i) = a^2/3, \quad (2.3)$$

kde a jsou meze rovnoměrného rozdělání. Pokud je uvažováno trojúhelníkové rozdělání, std. nejistota se vypočte jako

$$u^2(x_i) = b^2/6, \quad (2.4)$$

kde b jsou meze trojúhelníkového rozdělání.

3. Výpočet citlivostních koeficientů c_i dle vztahu:

$$c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}. \quad (2.5)$$

4. Výpočet standardní nejistoty $u(Y)$ výstupní veličiny Y pomocí zákona šíření nejistoty, jenž je dán vztahem:

$$u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i). \quad (2.6)$$

$$u_c^2(y) = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 u^2(x_i). \quad (2.7)$$

5. Pokud je funkce f významně nelineární, je třeba k výrazu $u^2(y)$ připočítat druhý řád Taylorova rozvoje vlivu veličiny na výstupní veličinu:

$$\sum_j \sum_i \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i \partial x_j^2} \right) u^2(x_i) u^2(x_j). \quad (2.8)$$

6. V případě korelovaných vstupních veličin je třeba k výrazu $u^2(y)$ připočítat korekci

$$2 \sum_i \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} u(x_i, x_j). \quad (2.9)$$

7. Efektivní stupeň volnosti lze získat Welch-Satterwaithovým vztahem

$$\nu_{\text{eff}} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_i \frac{u_i^4(y)}{\nu_i}}, \quad (2.10)$$

kde ν_i jsou stupně volnosti nejistot $u(x_i)$.

8. Koeficient pokrytí k je určen pomocí studentova rozdělení jako:

$$1 - \alpha = \int_{-\text{inf}}^{t_{1-\alpha}} f(t, \nu_{\text{eff}}) dt, \quad (2.11)$$

kde $k = t_p$, $p = 1 - 2\alpha$ a $f(t, \nu)$ je kumulativní rozdělovací funkce studentova rozdělení.

9. Rozšířená nejistota U je určena jako:

$$U = k u_c(y) \quad (2.12)$$

10. Pak lze tvrdit, že výsledek měření je $Y = y \pm U$ a pravá hodnota náhodné veličiny Y' leží s pravděpodobností p v intervalu:

$$Y - U \leq Y' \leq Y + U \quad (2.13)$$

Tento matematický aparát může být pro některé případy naprosto nevhodný, je třeba se dopouštět mnoha zjednodušení a aproximací. Pro významnou část lidí, kteří nejsou profesionální metrologové, je navíc tento aparát poměrně komplikovaný.

Metoda Monte Carlo

MMC je třída algoritmů pro simulaci systémů. Používá opakované vzorkování náhodné veličiny pro simulaci náhodných dějů. Metoda je používána pro řešení diferenciálních rovnic nebo počítání určitých integrálů. Pomocí této metody se úspěšně daří simulovat experimenty, které jiné metody nedokážou úspěšně vyřešit, jako jsou řetězové štěpné reakce, difuze plynů nebo proudění tekutin za speciálních podmínek. Metodu lze také využít pro výpočet nejistot. Metodu Monte Carlo vyvinuli John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis kolem roku 1940 v Los Alamos během vývoje atomové bomby. S. Ulam měl myšlenku používání náhodných čísel pro simulaci experimentu, von Neumann použil metodu generování náhodných čísel místo do té doby používaného seznamu náhodných čísel, a Metropolis vypracoval algoritmy výpočtů.

Metoda byla pojmenována po městě Monte Carlo v Monaku, kde Ulamův strýc často prohrával peníze v místním proslaveném kasinu.

Metoda spočívá v řízeném generování náhodných čísel a opakované simulaci experimentu. Dá se použít například i pro výpočet čísla $\pi = 3,14159\dots$. Mějme jednotkový čtverec (strany o velikosti 1), ve kterém je vepsaný jednotkový kruh (poloměr kruhu je 1). Dále umístíme do čtverce body. Obsah kruhu je $S_1 = \pi r^2$, obsah čtverce je $S_2 = r^2$. Označme celkový počet bodů ve čtverci jako N , a počet bodů, které jsou v čtverci i v kruhu jako M . Pak platí:

$$\frac{S_1}{S_2} = \frac{\pi r^2}{r^2} = \frac{M}{N} \Rightarrow \pi = \frac{M}{N} \quad (3.1)$$

Pokud jsou body do čtverce umísťovány náhodně (tj. generujeme náhodná čísla souřadnic bodů), pro stoupající počet náhodně umístěných bodů dostaneme číslo π přesněji, viz následující tabulka:

počet bodů:	10^1	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6
výpočet:	2,4	3,08	3,18	3,1426	3,14232	3,1419
odchylka od π :	0,74	0,062	$-3.8 \cdot 10^{-2}$	$-1.0 \cdot 10^{-3}$	$-7.3 \cdot 10^{-4}$	$-3.1 \cdot 10^{-4}$

Se zvětšujícím se počtem bodů klesá odchylka od pravé hodnoty π . Zvýšením řádu opakování získáme obvykle jednu cifru π . Tato metoda není moc účinná,

slouží pouze pro ukázkou, že generováním náhodných čísel (pozic bodů ve čtverci) lze získat konkrétní výsledky. Moderní iterační metody získají 5 cifer π každým výpočetním krokem.

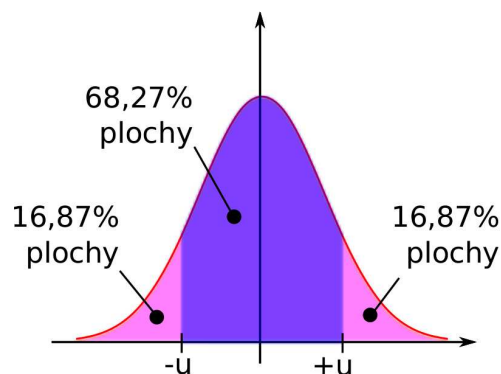
Náhodná čísla musí být opravdu náhodná. Kdybychom měli například generovat body poblíž středu kruhu, počet bodů v kruhu by se rovnal celkovému počtu bodů. S libovolným počtem vygenerovaných bodů bychom získali vždy hodnotu 1 místo 3,14. . . .

Výpočet nejistot MMC

Nejistoty se vypočítají pomocí MMC následujícím postupem:

1. Nejprve je třeba vytvořit model měření $y = f(x_1, \dots, x_N)$. Pro každou vstupní veličinu X_i je třeba určit hustotu pravděpodobnosti její nejistoty $u(x_i)$. Tyto údaje je nutné znát pro metodu GUF i MMC. Dále je třeba si zvolit počet opakování metody Monte Carlo M a požadovanou pravděpodobnost pokrytí výstupní veličiny p .
2. Pro každou vstupní veličinu X_i je třeba vygenerovat M náhodných čísel x_i^1, \dots, x_i^M podle hustoty rozdělení nejistot. Dohromady je tedy vygenerováno $M \cdot N$ náhodných čísel.
3. Do modelu měření jsou dosazována vygenerovaná náhodná čísla: $y_j = f(x_1^j, \dots, x_N^j)$. Tak je získáno M výsledných hodnot y_1, \dots, y_M .
4. Seřazením hodnot y_j je získán histogram výstupní veličiny Y neboli diskrétní hustota pravděpodobnosti a diskrétní distribuční funkce.
5. Je určena nejpravděpodobnější hodnota Y (obvykle vrchol histogramu).
6. Je určena nejistota odpovídající požadované pravděpodobnosti pokrytí. Nejistota je určena mezemi plochy pod křivkou hustoty pravděpodobnosti Y obsahující p podíl z celkové plochy pod křivkou hustoty pravděpodobnosti Y

Určení nejistoty z histogramu, neboli hustoty pravděpodobnosti rozdělovací funkce je zobrazeno na následujícím obrázku.



Pro zvolenou pravděpodobnost pokrytí nalezneme takový podíl plochy pod křivkou ku celé ploše pod křivkou, odpovídající dané pravděpodobnosti. Okraje nalezené plochy určují interval nejistot. Zobrazeno je normální rozdělení, pro které pravděpodobnost 68,27% odpovídá standartnímu rozptylu ze všech hodnot vypočtených metodou Monte Carlo y_1, \dots, y_M .

Hodnota M počtu opakování MMC lze určit i v průběhu výpočtu: s metodou MMC pokračujeme tak dlouho, dokud nedosáhneme konvergence a změna nejistoty výstupní veličiny je menší než požadovaná přesnost (obvykle dvě cifry). Pro většinu výpočtu nejistot stačí hodnota M rovna 10^6 .

Srovnání GUF a MMC

Výhody a nevýhody MMC jsou:

- MMC umožňuje počítat nejistoty i s komplikovanými rozděleními vstupních veličin, jako je rozdělení tvaru U, nesymetrická rozdělení atd.
- Lze počítat s komplexními čísly.
- Není potřeba derivovat, zjednodušovat model měření a dopouštět se zjednodušení při výpočtech.
- Není třeba odhadovat a počítat stupně volnosti jako v metodě GUF.
- Nevýhodou MMC je nutnost mít kvalitní generátor náhodných čísel a vhodný software.
- Nelze spočítat ani jednoduché nejistoty na papíře.
- Z metody MMC se obtížně získávají citlivostní koeficienty.

Metodou GUF v případě komplikovaných modelů měření dostaneme podceňenou nejistotu, což může způsobit závažné problémy. Například ukázkový příklad v Guide to the Expression of Uncertainty in Measurements, Annex H, příklad koncových měřek:

Výsledek získaný metodou GUF je:

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

Ovšem výsledek získaný MMC je:

$$\delta L = (838 \pm 67) \text{ nm}, p = 95,45\%, 53 \times 10^4 \text{ opakování}.$$

Tento poměrně komplikovaný příklad z praxe obsahuje vstupní veličiny s rovnoměrným, trojúhelníkovým, trapezoidálním i U rozdělením. To způsobuje chybu ve výsledku vypočteném metodou GUF.

Software pro MMC

Hlavní předpoklad správnosti MMC je náhodný generátor čísel. Moderní metody generování náhodných čísel mají dostatečnou míru entropie pro běžné výpočty nejistot metodou MMC. Dále je třeba software, který dokáže zpracovat milióny čísel.

Běžně používaný program je například Matlab, nebo jeho open-source varianta Octave, případně program R pro statistické výpočty, či OpenBUGS, který je specializovaný na metodu Monte Carlo.

Na trhu existuje několik programů vytvořených k počítání nejistot, jako jsou Gum Workbench Pro nebo Qualisyst QMSys GUM Professional, které jsou placené.

Všechny tyto programy mají dostatečně kvalitní generátor náhodných čísel. Nevhodné jsou naopak tabulkové procesory kancelářských balíků, protože milion řádků nebo sloupců náhodných čísel v tabulce těchto programů způsobuje přílišné zatížení procesoru i při nejjednodušších výpočtech.

Nejhorsí je použití programů Microsoft Excel 2000 a Excel 2003, které mají nedostatečnou entropii náhodného generátoru čísel. Ve verzi 2007 již byla chyba opravena, ale náhodná čísla generována vnitřním skriptovacím jazykem Visual Basic for Application (VBA) jsou stále nevhodná.

Centrum pro rozvoj výzkumu pokročilých řídicích a senzorických technologií
CZ.1.07/2.3.00/09.0031

Ústav automatizace a měřicí techniky
VUT v Brně
Kolejní 2906/4
612 00 Brno
Česká Republika

<http://www.crr.vutbr.cz>
info@crr.vutbr.cz