УДК 519.676

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ МЕТОДІВ ОЦІНЮВАННЯ ТОЧНОСТІ РЕЗУЛЬТАТІВ ВИМІРЮВАНЬ З УРАХУВАННЯМ КОНЦЕПЦІЇ НЕВИЗНАЧЕНОСТІ

В.В. Новіков

Навчально-науковий комплекс «Інститут прикладного системного аналізу» НТУУ «КПІ»

Викладений метод Монте-Карло для оцінювання точності результатів вимірювань. Запропоновано варіант оптимізації даного методу, що зменшує його обчислювальну складність. Виконано порівняння методів на конкретних прикладах, зроблені висновки та окреслено напрямки подальших досліджень.

Ключові слова: невизначеність, моделювання Монте-Карло, обчислювальна складність.

Будь-який результат вимірювання є неповним без чіткого твердження про точність отриманого значення. Тільки тоді, коли відома точність, результати вимірювань можуть бути порівняні, або скомбінованими, щоб оцінити якусь іншу фізичну величину, що цікавить. Зростання та важливість кількісних вимірювань, за рахунок торгівлі та комерції, в додачу до традиційних сфер науки та техніки, зробили суттєвим розуміння оцінювання точності вимірювань для все більшої аудиторії.

Сучасний підхід світової та вітчизняної метрології до оцінювання точності результатів вимірювань враховує положення концепції невизначеності результату [1-3]. Згідно з якою поняття «істинного значення», на відміну від теорії похибок, не приймає до уваги а оперує вхідними величинами та результатом вимірювання, як випадковими величинами. Оцінювання точності вимірювань в рамках даної концепції базується на класичній теорії ймовірностей та математичній статистиці. Зауважимо, що концепція невизначеності носить загальний та універсальний характер і використовується не тільки в метрології [4,5].

Алгоритм оцінювання точності результатів в рамках даної концепції викладений як в нормативних документах[1-3], так і в наукових роботах[6,7]. Підхід було автоматизовано та впроваджено на території України[8], але він має ряд недоліків щодо точності обчислення [9,10]. В останні роки, з появою більш потужних обчислювальних машин, пропонується застосовувати метод моделювання Монте-Карло(далі - ММК) для оцінювання точності результатів вимірювань в рамках концепції невизначеності[9-13], що має ряд переваг, але вимагає великих обчислювальних потужностей. Нещодавно ММК почали використовувати для обчислення невизначеності для не метрологічних задач[15-17]. З іншого боку, завжди виникала необхідність оптимізації ММК, для зменшення його обчислювальної складності[9,12,14,15].

У даній роботі пропонується та аналізується варіант модифікації ММК, який полягає в оптимальному та адаптивному виборі кількості реалізацій ММК. У розділі 1 формально описана задача оцінювання точності результатів вимірювань – оцінювання невизначеності. Детально розглядається так звана «друга фаза» оцінювання – обчислення, коли на «першій фазі» математична модель вимірювання та її вхідні параметри вже визначені. Алгоритм ММК оцінювання розглянутий в розділі 2.

Розроблену модифікацію ММК описано у розділі 3, розглянуто алгоритм та особливості модифікації у порівнянні із класичним уявленням. У розділі 4 викладені результати обчислювальних експериментів для абстрактних моделей вимірювань. Розділ 5 порівнює результати обчислень різних методів ММК для деяких реальних вимірювань.

Висновки та пропозиції щодо подальших дослідження наведені в висновках.

1. Формалізація задачі

Незалежно від області застосування, фізична величина, що цікавить, рідко може бути виміряна безпосередньо [1]. В загальному випадку, вона визначається з урахуванням певних впливів вхідних величин, які самі можуть бути результатами вимірювань, або виведені з певних результатів вимірювань та іншої інформації. Фундаментальною залежністю між вхідними величинами та вимірюваною величиною є модель. Нехай n вхідних(випадкових) величин позначені як $X = (X_1,...,X_n)^T$ і вимірювана величина, вихідна величина як $Y = (Y_1,...,Y_n)^T$ (в більшості практичних випадків скалярне значення). Тоді математична модель вимірювання $Y = f(X)$ може бути функціональною залежністю, чисельно наближеною функцією або певним алгоритмом. Оцінка y величини Y є результатом вимірювання.

Як відомо, задача оцінювання невизначеності складається з двох фаз – формулювання моделі та обчислення[1,9]. 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. Перша фаза оцінювання, тобто шляхи отримання цієї інформації для конкретного вимірювання не є предметом даної роботи, вважаємо, що перша фаза оцінювання вже виконана і сконцентруємо нашу увагу на другій фазі оцінювання. Друга фаза оцінювання невизначеності полягає в обчисленні тих даних, що отримані на попередній фазі з метою оцінки функції розподілу $G(y)$ (функції щільності $g(y)$), оцінок моментів та інтервалу покриття для заданої імовірності вимірюваної величини Y. Друга фаза оцінювання невизначеності є чисто обчислювальною задачею і не потребує будь-якої інформації чи методів з метрології.

Далі будемо розглядати Y як скаляр. Зазначимо, що оцінка стандартного відхилення – стандартна невизначеність(позн. $u(y)$) результату вимірювання. Окрім того, для кількісного описання невизначеності, що асоціюється з результатом вимірювання необхідно визначити інтервал покриття для певної імовірності. Наприклад, 95% інтервал покриття буде визначатись 0.025- та 0.975 – квантілями $G(y)$, де під α-квантілем розуміємо таке y, що $G(y) = \alpha$.

Слід також зазначити, що другу фазу оцінювання, тобто обчислення проводять з певною точністю, що визначається на першій фазі оцінювання невизначеності – в тих припущеннях та неточностях, що були зроблені. В будь-якому випадку обчислення не повинні зменшувати точність, що була отримана на першій фазі оцінювання [9].

Щільність $g(y)$ в загальному випадку можна записати як:

$$g(y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \ldots \int_{-\infty}^{\infty} g_{in}(x)\delta(y - f(x))dx_n dx_{n-1} \ldots dx_1, \qquad (1)$$

тут $\delta(\cdot)$ - дельта функція Дірака, $g_{in}(x)$ - сумісна функція розподілу вхідних величин. Загальновідомо, що задача точного аналітичного визначення $g(y)$ чи $G(y)$ вирішена лише для найпростіших випадків. Задачі наближеного визначення $g(y)$ можна поділити на наближені аналітичні методи та чисельні методи[9,14].

Наближені аналітичні методи[1-3,6] базуються на розкладі функції f в ряд Тейлора до членів певного порядку малості та оцінці стандартного відхилення $u(y)$ з стандартних відхилень $u(x_i)$, і, після деяких припущень щодо закону розподілу Y отримання інтервалу покриття шляхом множення $u(y)$ на відповідний квантіль розподілу. Як показано в ряді робіт[9,12,14], цей метод не задовольняє вимоги щодо точності і може бути застосований не в усіх випадках.

2. Метод ММК

Зрозуміло, що застосування формули (1), як бази для чисельних методів є сумнівним. Була б необхідна багатовимірна чисельна процедура інтегрування з заданою точністю для кожного y. Більше того, процедуру необхідно було б повторити для великої множини значень y, щоб адекватно оцінювати $g(y)$.

Замість того, щоб оцінювати інтеграл (1), моделювання Монте-Карло реалізує зовсім інший підхід[9,10]:

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

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

3. Приймаємо за результат вимірювання y – середнє арифметичне набору $y_1 ... y_M$, стандартну невизначеність – оцінку стандартного відхилення, наприклад середньоквадратичне відхилення $y_1 ... y_M$.

4. Відсортуємо отримані $y_1 ... y_M$ за зростанням. Визначаємо інтервал покриття для імовірності p: $y_{[\frac{(1-p)*M}{2}]}, y_{[\frac{(1+p)*M}{2}]}$.

Схематично алгоритм зображений на рис.1.

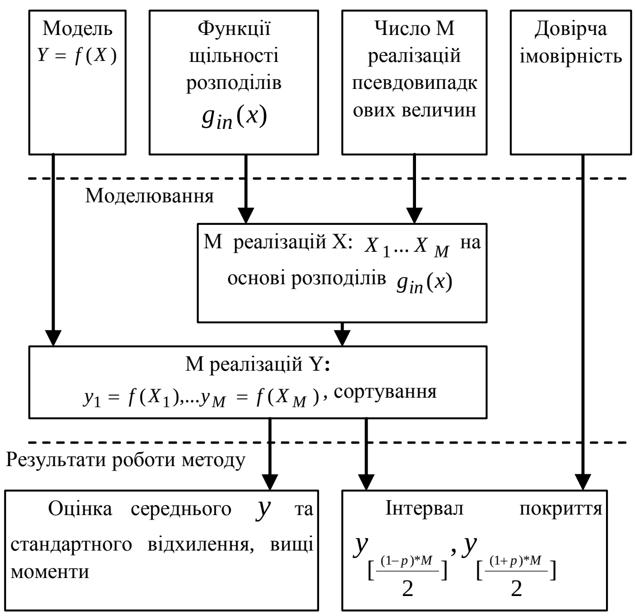

Рис.1. Схематичне зображення ММК

За необхідності, можна отримати оцінки вищих моментів з отриманої послідовності реалізацій.

Згідно Центральної Граничної Теореми оцінка першого моменту y збігається зі швидкістю $1/\sqrt{M}$, якщо стандартне відхилення y існує, тобто не залежить від кількості вхідних величин, над відміну від задачі чисельного інтегрування (1).

Питанням вибору параметру М алгоритму залишається відкритим. Більше того, цей параметр не можна вибрати якимось чином щоб гарантовано отримувати необхідну точність із-за випадкової природи моделювання[9,14]. Тому логічним кроком до підвищення ефективності алгоритму, зменшення обчислень та гарантування точності є адаптивний вибір параметру М.

3. Модифікація ММК

Авторам відомі ряд досліджень[9,11,13,18], у яких рекомендують вибирати і вибирають $M = 10^5 ... 10^6$ для практичних вимірювальних задач, з аргументуванням, що для більшості задач такого М повинно бути достатньо для отримання необхідної точності.

Якщо вибирати М апріорі таким чином, то можливо реалізувати такі два випадки:

1. Алгоритм буде задовольняти вимоги задачі щодо точності(можливо навіть з більшою точністю, ніж необхідно), але будуть проведені зайві обчислення. Тобто, алгоритм буде не ефективним, особливо зважаючи на те, що для складних задач з великою кількістю вхідних величин час роботи алгоритму є досить суттєвий – секунди(для $M = 10^6$) на сучасних ПЕОМ.

2. Вибраного М буде недостатньо для даної задачі і алгоритм не буде задовольняти вимоги щодо точності для конкретної задачі.

Тому, на наш погляд, апріорного вибору параметра М слід уникнути. Для цього пропонується наступний алгоритм, як модифікація ММК з адаптивним вибором параметра М, що зважає на стохастичну природу чисельного методу:

1. Вибираємо початкове значення M та значення збільшення числа реалізацій на кожному кроці - M_{inc}. Визначимо вимоги щодо точності методу. Нехай Δ - ширина довірчого інтервалу з довірчою імовірністю 0.9545 для

шуканих квантілів $G(y)$. Тобто це ширина довірчого інтервалу для границь інтервалу покриття y.

2. Виконуємо кроки 1,2,4 методу ММК для вибраного M.

3. Обчислюємо[19]:

$$\varepsilon_\alpha = | y_{[M\alpha - 2\sqrt{M\alpha(1-\alpha)}]} - y_{[M\alpha + 2\sqrt{M\alpha(1-\alpha)}]} |, \tag{2}$$

для кожного α-квантіля $G(y)$, що оцінюється. Обчислюємо $\varepsilon = \max\limits_{\alpha}(\varepsilon_\alpha)$

4. Якщо $\varepsilon > \Delta$, то використовуємо кроки 1-2 методу ММК для M_{inc}.

5. Отримані значення $y_{j1}...y_{jM_{inc}}$ об'єднуємо та сортуємо за зростанням з вже відсортованим масивом $y_1...y_M$, в результаті отримуємо відсортований масив $y_{i1}...y_{iM_{inc}+M}$. $M = M = M_{inc}$ та повертаємось на крок 3.

6. Якщо $\varepsilon \le \Delta$, то ширина довірчого інтервалу для шуканих квантілів $G(y)$ не буде перевищувати Δ. Визначаємо інтервал покриття: $y_{[\frac{(1-p)*M}{2}]}, y_{[\frac{(1+p)*M}{2}]}$.

Слід зауважити, що:

1) M_{inc} не обов'язково вибирати однаковим кожного кроку;

2) можна ставити умову щодо Δ для іншої довірчої імовірності, тоді в (2) буде інший коефіцієнт покриття перед квадратним коренем [19];

3)Сортування не відсортованого масиву з вже відсортованим слід виконувати за оптимальним алгоритмом, оскільки цей крок забирає найбільше часу(пропорційно до $M \ln M$);

4)Алгоритм можна ефективно реалізувати в рамках паралельних обчислень на багатопроцесорних обчислювальних системах.

4.Обчислювальний експеримент для абстрактних вимірювальних моделей.

Оскільки швидкість роботи запропонованого алгоритму оцінити теоретично складно із-за стохастичної природи адаптивного вибору кількості реалізацій, ефективність роботи алгоритму аналізувалась шляхом проведення обчислювальних експериментів.

У проведеному обчислювальному експерименті порівнюється точність та час обчислення класичним ММК та запропонованим адаптивним ММК. Абстрактна математична модель вимірювання була взята наступною: $f(X) = (\sum_{i=4}^{6} X_i + \prod_{i=1}^{3} i * X_i)/9$, де X_i- рівномірно розподілені на відрізку [0;1] випадкові величини. В моделі присутні адитивні поправки та мультиплікативні коефіцієнти, що присутні в більшості, як простих так і складних, реальних вимірювальних моделях. Окрім того, модель є нормованою, $f(X) \in [0;1]$, що полегшить якісну оцінку вимог щодо Δ. Для реалізації ММК взято $M = 10^6$

У таблиці 1 наведені результати 8 варіантів оцінювання невизначеності за кожним алгоритмом для двох різних довірчих ймовірностей, що найчастіше зустрічаються в метрологічній практиці(0.95 та 0.99) та чотирьох варіантів необхідної точності(10%,1%,0.5%,0.1%). В таблиці: Δ - необхідна точність оцінювання - ширина довірчого інтервалу(для імовірності 0.9545) оцінки границь інтервалу покриття для y, M – кількість фактичних реалізацій методу, M_{inc}- параметр для модифікованого ММК, t – середній час(із десяти запусків) роботи алгоритму на ПЕОМ класу Intel Centrino Duo 2,3 Ггц, Δ_{real} - дійсне значення точності.

Як свідчать результати обчислень, запропонований метод завжди виконує вимоги щодо точності, у порівнянні із класичним ММК (бо це умова зупинки його роботи) і працює на порядки швидше за оптимального вибору M, а отже, відсутності зайвих обчислень, окрім тих випадків, де ММК не виконує вимоги щодо точності(для $\Delta = 0.001$ або 0.1% у відносних одиницях). В цих випадках ММК з даним M не придатний до використання. Слід особливо звернути увагу на час обчислення та M в цих випадках для модифікованого ММК. Результат свідчить про те, що подальша оптимізація алгоритму є досить актуальною, адже, якщо припустити математичну модель вимірювання суттєво складніше за взяту в експерименті, з більшою кількістю вхідних величин і з високими вимогами щодо Δ, то слід очікувати значний час обчислення, навіть на сучасних ПЕОМ. Це може привезти до безкорисності результату обчислення, якщо він потрібен протягом деякого часу і з визначеними економічними затратами на його обчислення. Варто зауважити витрати пам'яті на збереження $M = 1.214*10^7$ змінних розміром, наприклад 10 байт, що складатиме 121,4 Мб.

Таблиця 1. Результати роботи алгоритмів ММК

Алгоритм, імовірність	Δ	M	M_{inc}	t (c)	Δ_{real}
Класичний ММК, p=0.95	0.1	10^6	-	2.092	0.00221
	0.01	10^6	-	2.092	0.00221
	0.005	10^6	-	2.092	0.00221
	0.001	10^6	-	2.092	0.00221
Модифікований ММК, p=0.95	0.1	10^4	10^4	0.016	0.02681
	0.01	$4*10^4$	10^4	0.093	0.00977
	0.005	$3*10^5$	10^5	0.703	0.00461
	0.001	$5*10^6$	10^5	13.453	0.00099
Класичний ММК, p=0.99	0.1	10^6	-	2.094	0.00347
	0.01	10^6	-	2.094	0.00347
	0.005	10^6	-	2.094	0.00347
	0.001	10^6	-	2.094	0.00347
Модифікований ММК, p=0.99	0.1	10^4	10^4	0.016	0.04029
	0.01	$1.3*10^5$	10^4	0.437	0.00999
	0.005	$6*10^5$	10^5	1.312	0.00496
	0.001	$1.214*10^7$	10^5	1623.773	0.00099

Як свідчать результати обчислень, запропонований метод завжди виконує вимоги щодо точності, у порівнянні із класичним ММК (бо це умова зупинки його роботи) і працює на порядки швидше за оптимального вибору M , а отже, відсутності зайвих обчислень, окрім тих випадків, де ММК не виконує вимоги щодо точності(для $\Delta = 0.001$ або 0.1% у відносних одиницях). В цих випадках ММК з даним M не придатний до використання. Слід особливо звернути увагу на час обчислення та M в цих випадках для модифікованого ММК.

Результат свідчить про те, що подальша оптимізація алгоритму є досить актуальною, адже, якщо припустити математичну модель вимірювання суттєво складніше за взяту в експерименті, з більшою кількістю вхідних величин і з високими вимогами щодо Δ, то слід очікувати значний час обчислення, навіть на сучасних ПЕОМ. Це може привезти до безкорисності результату обчислення, якщо він потрібен протягом деякого часу і з визначеними економічними затратами на його обчислення. Варто зауважити витрати пам'яті на збереження $M = 1.214 * 10^7$ змінних розміром, наприклад 10 байт, що складатиме 121,4 Мб.

5. Результати дослідження на реальній математичній моделі вимірювання.

Розглянемо приклад S9 з технічного звіту EA 4/02[20], що був обчислений за класичним ММК з $M = 10^6$ [9,12]- калібрування цифрового мультиметру на 100В постійного струму. Математична модель вимірювання: $E_X = V_{iX} - V_S + \delta V_{iX} - \delta V_S$. Всі вхідні величини детально описані в[20], наведемо лише функції розподілів кожної: V_{iX}-константа: 100,1 V; V_S- нормальний розподіл, середнє 0 V, стандартне відхилення 0.001 V; δV_{iX}- рівномірний розподіл, середнє 0 V, півширина – 0.05 V;δV_S- рівномірний розподіл, центр 0 V, півширина – 0.011 V. Необхідно визначити інтервал покриття для результату вимірювання з p=0.95 та з $\Delta = 0.01$V для границь цього інтервалу.

Таблиця 2. Результати роботи алгоритмів ММК для реальної моделі вимірювання.

Алгоритм	Δ,V	M	M_{inc}	t (c)	Δ_{real},V
Класичний ММК	0.01	10^6	-	0.626	0.00161
Модифікований ММК	0.01	10^4	10^4	0.015	0.00565

В таблиці 2 наведено результати роботи класичного ММК та модифікованого ММК. Позначення стовбців аналогічне таблиці 1. Як видно з таблиці 2, класичний ММК має багато зайвих обчислень, модифікований ММК показує на порядок менший час обчислення в рамках заданих параметрів.

Висновки

Запропоновано варіант модифікованого моделювання Монте-Карло для оцінювання невизначеності результатів вимірювань, що полягає в адаптивному оптимальному виборі параметра M - кількості реалізацій моделювання. Модифікація збільшила ефективність при експериментальному дослідженні. Час обчислення зменшився на порядки у порівнянні з класичним ММК. В тих випадках, де ММК не задовольнив вимог щодо точності, модифікований ММК має більший час обчислення, але виконує вимоги щодо точності результату.

Важливими напрямками подальших досліджень буде реалізація алгоритму на багатоядерних та багатопроцесорних обчислювальних системах для обчислень з метою підвищення ефективності роботи запропонованого алгоритму та зменшення часу його роботи. Такі дослідження дозволять впровадити модифікований ММК у вигляді програмної реалізації для повсякденних практичних розрахунків невизначеності, що виникають в метрології та в інших сферах застосування концепції невизначеності.

ЛІТЕРАТУРА

1. Guide to the expression of uncertainty in measurement(GUM), Керівництво з вираження невизначеності у вимірюваннях: Second edition, ISO, Geneva,1995.
2. РМГ 29-99 «ГСИ. Метрология. Основные термины и определения». – Минск: ИПК «Издательство стандартов» , 2000.
3. Чалый В.П. Неопределенность и погрешность, их сходство, различие и употребление в разных метрологических процедурах // Системы обработки информации. – Харьков. -2007. – Вып.7 (56). – с.82–85
4. Helton, J. C. Uncertainty and Sensitivity Analysis in the Presence of Stochastic and Subjective Uncertainty // Journal of Statistical Computation and Simulation. – 1997. – №57(3) – р.76-86.

5. Helton, J. C., Johnson, J. D., and Oberkampf, W. L. An Exploration of Alternative Approaches to the Representation of Uncertainty in Model Predictions // Reliability Engineering and System Safety. – 2004. – №39 – P.71-77.
6. Willink R., Hall B. D. A classical method for uncertainty analysis with multidimensional data // Metrologia – 2002. - №39. – P.361–369.
7. Захаров И.П., Кукуш В.Д. Теория неопределенности в измерениях. – Х.:Консум, 2002. – 256 с.
8. В.В. Новиков, А.Н.Коцюба. Автоматизация процесса вычисления оценок неопределенности измерений // Системи обробки інформації. – Харків. – 2006. – Вип.7(56). – с.59–с.61.
9. Cox M. and others. Best Practice Guide No6. Uncertainty and statistical modeling. Technical Report, National Physical Laboratory, Teddington, UK-2001.
10. Новиков В.В.. Вычисление расширенной неопределенности // Системи обробки інформації. – Харків. – 2007. – Вип.6(64). – С.73–77.
11. Кокс М., Харрис П., Зиберт Б.Р.-Л. Оценивание неопределенности измерений на основе трансформирования распределений с использованием моделирования по методу Монте-Карло // Измерительная техника. – 2003. - №9. – С.9-14.
12. Новиков В.В. Численные методы в вычислении неопределенности // Системи обробки інформації. – Харків. – 2008. – Вип.4(71). – С.126-128.
13. Захаров И.П., Водотыка С.В. Применение метода Монте-Карло для оценивания неопределенности в измерениях // Системи обробки інформації. – Харків. – 2008. – Вип.4(71). – С.34-37.
14. Walter Bich, Maurice G. Cox , Peter M. Harris. Evolution of the ‘Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement’ // Metrologia – 2006. – №43. – P.161–166.

15. Soon Thiam Khu, Micha G.F. Werner. Reduction of Monte-Carlo simulation runs for uncertainty estimation in hydrological modeling // Hydrology and Earth System Sciences – 2003. – №7(5). – P.680-692.
16. V. Kreinovich, J. Beck, C. Ferregut, A. Sanchez, G. R. Keller, M. Averill and S. A. Starks. Monte-Carlo-Type Techniques for Processing Interval Uncertainty, and Their Potential Engineering Applications // http://www.cs.utep.edu/vladik/2004/tr04-23c.pdf
17. H. Machguth, R. S. Purves1, J. Oerlemans, M. Hoelzle1, and F. Paul. Exploring uncertainty in glacier mass balance modelling with Monte Carlo simulation // The Cryosphere Discuss. – 2008. – №2. –P.447–485.
18. Herrador, M.A., González, A.G. Evaluation of measurement uncertainty in analytical assays by of Monte-Carlo simulation // Talanta – 2004 – №64. – P.415-422.
19. Соболь И.М. Метод Монте-Карло. 4-е изд. доп. и перераб. – М.:Наука, 1995. – 78с.
20. EA. Expression of the uncertainty of measurement in calibration. Technical Report EA-4/02, European Co-operation for Accreditation, 1999.