БАЙЕСОВСКИЙ ПОДХОД К ОЦЕНИВАНИЮ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЙ В ДОКУМЕНТАХ JCGM

И.П. Захаров, О.А. Боцюра
Харьковский национальный университет радиоэлектроники,
кафедра метрологии и измерительной техники,
просп. Ленина,14, г. Харьков, Украина, *newzip@ukr.net*

Резюме: В докладе рассмотрена история и перспектива разработки документов JCGM по оцениванию неопределенности измерения. Показано, что внедрение байесовского подхода в эти документы является стратегической задачей WG 1 JCGM. Рассмотрена реализация байесовского подхода в действующих нормативных документах JCGM. Показаны противоречия GUM этим документам.

Ключевые слова: неопределенность измерений, плотность распределения вероятности, закон распространения распределений, байесовский подход, метод Монте-Карло.

1. Введение и постановка задачи

В 1997 году семью ведущими международными организациями (BIPM, ISO, OIML, IEC, IUPAP, IUPAC, IFCC) был создан Объединенный комитет по руководствам в Метрологии (JCGM), возглавляемый директором BIPM. В рамках JCGM учреждены две Рабочие группы. Задачей Рабочей группы 1 (WG 1) является подготовка документов по выражению неопределенности в измерениях. В настоящее время этой группой выпущены документы: JCGM 100:2008 [1]; JCGM 101:2008 [2]; JCGM 102:2011 [3]; JCGM 104:2009 [4]; JCGM 106:2012 [5].

Следует отметить, что документ [1] является стереотипным изданием «Руководства по выражению неопределенности измерений» (GUM), опубликованного впервые еще в 1993 году. В основу GUM положен т.н. закон распространения неопределенностей (LPU), имеющий следующие недостатки:

- процедура, описанная в GUM, не зависит от реального закона распределения измеряемой величины;
- не определен диапазон применимости LPU, построенного на разложении уравнения измерения в ряд Тейлора первого порядка, использование членов второго порядка при записи LPU выполнено корректно только для гауссовских распределений;
- некорректно осуществляется нахождение расширенной неопределенности: не выработаны рекомендации по оцениванию расширенной неопределенности не только для случая существенно нелинейного уравнения измерений, но и при отличии функции распределения измеряемой величины от нормальной; формула Велча-Саттерсвейта работает только при некоррелированных данных и даже в этом случае степень ее корректности не определена.

Многочисленные недостатки LPU, положенного в основу [1], привели к необходимости разработки подхода, основанного на законе распространения распределений (LPD), суть которого заключается в следующем:

1. Производится установление модели, связывающей измеряемую величину Y с входными величинами $X_1,...X_N$:

$$Y = f(X_1,...X_N) . \tag{1}$$

2. На основе имеющейся информации задаются функции плотности вероятности (pdf) для входных величин. Для коррелированных входных величин задается совместная pdf.

3. Выполняется трансформирование pdf для входных величин через модель (1) для получения pdf выходной величины.

4. Производится использование pdf выходной величины для получения: математического ожидания Y, принимаемого за оценку y измеряемой величины; стандартного отклонения Y, принимаемого за стандартную неопределенность измеряемой величины $u(y)$; интервала охвата, содержащего Y с установленной вероятностью p (вероятностью охвата).

LPD можно реализовать аналитическими и численными методами. Аналитические методы идеальны, однако применимы только в простых случаях.

Численной реализацией LPD явился метод Монте-Карло, примененный в двух документах JCGM: GUM-S1 и GUM-S2 − приложениях 1 и 2 к GUM [2,3].

Анализ этих документов показывает, что при их разработке был использован байесовский подход к оцениванию неопределенности измерений. Аналогичный подход использован и в более позднем документе [5].

Сравнение оценок суммарной стандартной неопределенности, получаемых с использованием подходов, описанных в [1] и [2], показывает их численное отличие, обусловленное, прежде всего, различием в нахождении стандартных неопределенностей входных величин по типу А.

Это поставило задачу перед WG1 ревизии GUM [6]. Основным мотивом для принятия решения о пересмотре GUM являлось то, что GUM, после принятия GUM-S1 и GUM-S2, больше не согласуется с ними.

Кроме того, байесовский подход будет положен в основу последующих документов JCGM:

- JCGM 105. Evaluation of measurement data − Concepts, principles and methods for the evaluation of measurement uncertainty.
- JCGM 108. Evaluation of measurement data − Supplement 4 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” − Bayesian methods.

Первый документ, находящийся в разработке, предусматривает введение основных понятий и принципов, лежащих в основе GUM и связанных с ним документов, используя байесовскую точку зрения. Второй − планируемый для разработки на более поздней стадии – будет подробно описывать байесовские методы, применяемые для оценивания неопределенности измерений.

Таким образом, следует констатировать, что внедрение байесовского подхода в документы по оцениванию неопределенности измерений является стратегической задачей JCGM.

2. Основные принципы байесовского подхода

Если непрерывные зависимые случайные величины *X, Y* характеризуются pdf $g(x)$, $g(y)$, то их совместную pdf $g(x,y)$ можно выразить через условные распределения $g(y/x)$ и $g(x/y)$:

$$g(x,y) = g(x)\cdot g(y/x) = g(y)\cdot g(x/y).$$

Если $g(y)$ − известная априорная pdf для возможных результатов пока еще вообще не проведенных измерений, а $g(x/y)$ − распределение данных, получаемых при измерениях, то выражение для апостериорной pdf $g(y/x)$ может быть записано через теорему Байеса [7]:

$$g(y/x) = \frac{g(y)\cdot g(x/y)}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(y)\cdot g(x/y)dy}. \qquad (2)$$

Знаменатель (2) представляет собой маргинальную pdf $g(x)$.

Таким образом, для нахождения апостериорного распределения $g(y/x)$ необходимо решить следующие задачи:

1) получить (задать) априорное распределение $g(y)$;

2) задаться видом распределения, получаемого при измерениях $g(x/y)$;

3) вычислить числитель выражения (2);

4) вычислить знаменатель выражения (2) (маргинальную pdf);

5) определить апостериорное распределение $g(y/x)$.

Априорное распределение $g(y)$ иногда известно, в противном случае оно должно быть получено так, чтобы должным образом отражать имеющуюся информацию. В GUM-S1 [2] отмечено, что это может быть реализовано путем применения принципа максимальной энтропии (PME). Этот принцип позволяет выбрать предварительное распределение вероятностей из семейства всех распределений, удовлетворяющих ограничениям, налагаемых имеющейся информацией. PME используется в GUM-S1 для обоснования нескольких частных pdf, таких как гауссово, прямоугольное, треугольное трапецеидальное, арксинусное и другие.

Кроме того, в [2] рассматривается случай коррелированных входных величин, описываемых *N*-мерным распределением Гаусса $N(x, U_x)$, где U_x − матрица неопределенностей:

$$U_x = \begin{bmatrix} u^2(x_1) & u(x_1,x_2) & \dots & u(x_1,x_N) \\ u(x_2,x_1) & u^2(x_2) & \dots & u(x_2,x_N) \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \\ . & . & \dots & . \\ u(x_N,x_1) & u(x_N,x_2) & \dots & u^2(x_N) \end{bmatrix}$$

Также в [2] приведено аналитическое решение выражения (2) для оценивания ряда независимых наблюдений $x_1, x_2, ..., x_n$, полученных из величины, имеющей распределение Гаусса $N(\mu_0, \sigma_0^2)$, с неизвестными ожиданием μ_0 и дисперсией σ_0^2. Оно имеет вид масштабированного и сдвинутого *t*-распределения $t_\nu(\bar{x}, s^2/n)$ с $\nu = n-1$ степенями свободы:

$$g_x(\xi) = \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\left[1+\frac{1}{n-1}\left(\frac{\xi-\bar{x}}{s/\sqrt{n}}\right)^2\right]^{-n/2}}{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\sqrt{\frac{n-1}{\pi}}\frac{s}{\sqrt{n}}}, \quad (3)$$

где $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$, $s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$.

Это распределение имеет ожидание $E(x) = \bar{x}$ и дисперсию

$$V(X) = \frac{n-1}{n-3}\frac{s^2}{n}, \quad (4)$$

которая в $(n-1)/(n-3)$ раз больше оценки s^2/n, применяемой в GUM, и определяется только для $n > 3$.

3. Приложение 1 к GUM

В основу Приложения 1 к GUM [2] положена численная реализация LPD, суть которой заключается в выполнении следующих операций (рис. 1) [8]:

1. Задают pdf для входных величин $g(X_1)$, $g(X_2)$, …., $g(X_N)$. Ожидания и стандартные отклонения этих pdf соответствуют числовым значениям входных величин и их стандартным неопределенностям. Для коррелированных входных величин задается совместная pdf с заданной матрицей неопределенности.
2. Генерируют наборов случайных чисел, объемом $M = 10^5 - 10^6$ каждый, имеющих заданные в п.1. распределения входных величин.
3. Для установленной модели (1) производят трансформирование каждой реализации случайных чисел для входных величин $x_{1q}, x_{2q}, ..., x_{Nq}$ ($q = 1, 2, ..., M$) в соответствующую реализацию измеряемой величины $f(x_{1q}, x_{2q}, ..., x_{Nq})$.
4. Ранжированием полученных реализаций измеряемой величины получают набор значений $y_1, y_2, ..., y_N$ измеряемой величины, соответствующий дискретному представлению функции распределения $G_Y(\eta)$ для *Y*.
5. Используют полученные значения $G_Y(\eta)$ для получения оценки измеряемой величины *y*,

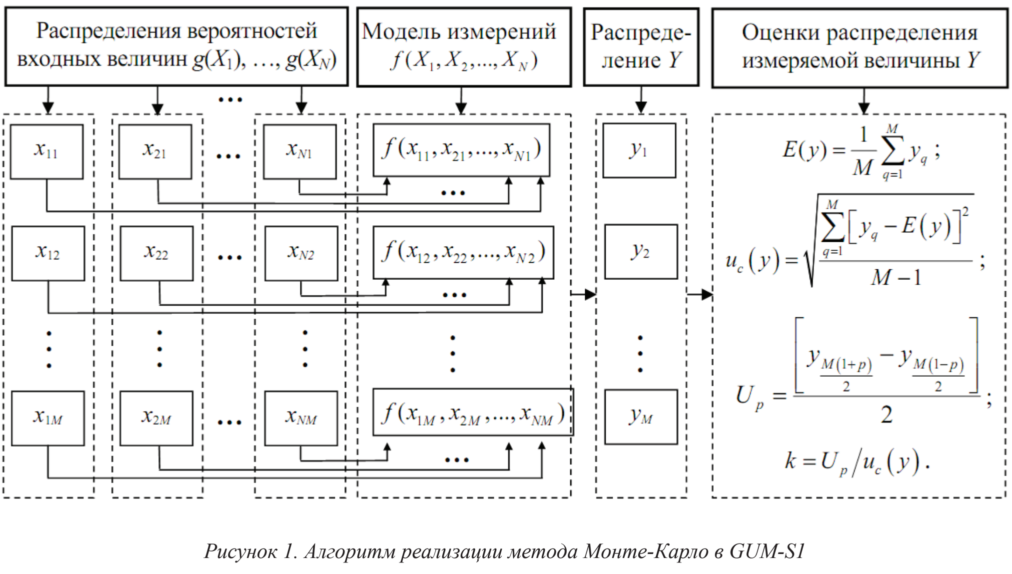

Рисунок 1. Алгоритм реализации метода Монте-Карло в GUM-S1

ее стандартной неопределенности $u(y)$ и вероятностносимметричного интервала охвата U_p для заданной вероятности *p* (рис. 1).

Для несимметричных распределений измеряемой величины кроме вероятностно-симметричного интервала можно получить наикратчайший интервал охвата, соответствующий заданной вероятности охвата *p*.

Поскольку при формировании наборов случайных чисел, соответствующих входным величинам, оцененным по типу А используется закон распределения Стьюдента (3), с дисперсией (4), получаемые оценки стандартной неопределенности будут соответствовать байесовским оценкам.

3. Приложение 2 к GUM

В GUM [1] и GUM-S1 [2] рассматриваются модели, включающие себя единственную скалярную величину. В GUM-S2 [3] рассматриваются многомерные модели с произвольным числом выходных величин. Результатом такого моделирования являются области охвата в форме эллипсоидов или прямоугольных параллелепипедов. Основным методом решения этой задачи является метод Монте-Карло, который дает возможность приближенного построения областей охвата наименьшего объема.

Основными этапами оценивания неопределенности измерений в этом случае являются: формулировка измерительной задачи, трансформирование распределений и получение окончательного результата.

Формулировка измерительной задачи включает в себя:

- задание измеряемой векторной величины **Y**;
- выявление входных величин, составляющих векторную входную величину **X**, от которых зависит **Y**;
- составление модели измерения, определяющей взаимосвязь **Y** с **X** в виде функции измерения или в более общем виде;
- приписывание pdf входным величинам X_i или совместного pdf для величин, которые не являются независимыми.

Трансформирование pdf предусматривает определение плотности совместного распределения выходной величины **Y** на основе плотности распределения входных величин X_i и используемой модели измерения.

Получение окончательного результата предполагает использование pdf **Y** для определения: оценки математического ожидания **Y** в виде **y**; ковариационной матрицы $\mathbf{U_y}$, соответсвующей **y**; области охвата, содержащей **Y** с заданной вероятностью *p* (вероятностью охвата).

В [3] рассматривается случай, когда имеется выборка наблюдений $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n$, размерностью $N \times 1$ каждая ($n > N$) из многометрного номального распределения с неизвестными математическим ожиданием и ковариационной матрицей расмерностью $N \times N$.

В этом случае, используя теорему Байеса, получают, что совместным распределением для измеряемой векторной величины ***X*** будет многомерное *t*-распределение $t_\nu(\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{S}/n)$ с $\nu = n - N$ степенями свободы, где

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 + \ldots + \mathbf{x}_n),$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\nu}\left[(\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}})^{\mathrm{T}} + \ldots + (\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})^{\mathrm{T}}\right].$$

Плотность распределения, полученного для **X**, имеет вид

$$g_{\mathbf{X}}(\xi) = \frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\left[\det\left(\frac{\mathbf{S}}{n}\right)\right]^{\frac{-1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)(\pi\nu)^{\frac{N}{2}}}\left[1 + \frac{(\xi - \bar{\mathbf{x}})(\xi - \bar{\mathbf{x}})^{\mathrm{T}-1}}{\nu \cdot \left(\frac{\mathbf{S}}{n}\right)}\right]^{\frac{-n}{2}}.$$

Математическое ожидание этого распределения будет равно $\mathbf{E}(\mathbf{X}) = \bar{\mathbf{x}}$, а ковариация:

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}) = \frac{\nu}{\nu - 2}\frac{\mathbf{S}}{n}.$$

3. JCGM-106

В JCGM-106 [5] рассматривается роль неопределенности измерений при оценке соответствия. Байесовскому подходу посвящены раздел 6 и приложение А этого документа.

В разделе 6 излагаются общие сведения о байесовской теореме, основных принципах получения апостериорного распределения $g(\eta|\eta_m)$ возможного значения измеряемой величины η при наличии измеренного значения η_m как комбинации априорного распределения $g_0(\eta)$ и функции правдоподобия $h(\eta_m|\eta)$, представляющей информацию, полученную с помощью измерения:

$$g(\eta|\eta_m) = Cg_0(\eta)h(\eta_m|\eta),$$

где C − константа, выбранная так, чтобы

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\eta|\eta_m)d\eta = 1.$$

Здесь же приводится итоговая информация, получаемая из $g(\eta|\eta_m)$, включающая в себя:

- наилучшую оценку

$$y = \int_{-\infty}^{\infty} \eta g(\eta|\eta_m)d\eta;$$

- стандартную неопределенность

$$u = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} (\eta - y)^2 g(\eta|\eta_m)d\eta};$$

- интервал охвата $[a,b]$, получаемый из выражения для заданной вероятности охвата p:

$$p = \int_a^b g(\eta|\eta_m)d\eta = G(b) - G(a).$$

В приложении A рассматривается ситуация, когда априорная pdf для измеряемой величины $g_0(\eta)$ и pdf, получаемая при измерениях $h(\eta_m|\eta)$, описываются нормальным законом с ожиданиями y_0 и η_m и стандартными отклонениями u_0 и u_m, соответственно. Показано, апостериорная pdf будет также нормальной с ожиданием, представляющим собой средневзвешенную оценку:

$$y = \frac{\dfrac{y_0}{u_0^2} + \dfrac{\eta_m}{u_m^2}}{\dfrac{1}{u_0^2} + \dfrac{1}{u_m^2}}$$

и стандартным отклонением:

$$u = \frac{u_0 u_m}{\sqrt{u_0^2 + u_m^2}}. \qquad (5)$$

Из выражения (5) видно, что стандартная неопределенность u, соответствующая оценке y, всегда меньше, чем u_0 и u_m.

Рассматриваются два случая, которые часто встречаются на практике:

- все существенные знания о возможных значениях Y получены из самих измерений, тогда $u \approx u_m$;
- при типичной калибровке используют средство измерений с неопределенностью u_m и эталон с неопределенность u_0, причем $u_0 \ll u_m$, в этом случае $u \approx u_0$.

4. Выводы

1. Анализ разработанных и перспективных документов JCGM показывает, что его стратегической задачей является внедрение байесовского подхода в документы по оцениванию неопределенности измерений.

2. Недостатки подхода, положенного в основу GUM, привели к необходимости внедрения подхода, основанного на LPD.

3. В GUM-S1 и GUM-S2 рассмотрена численная реализация LPD на основе МНК для скалярной и векторной измеряемых величин, соответственно. Показано, что оценки, получаемые с помощью МНК соответствуют байесовским оценкам.

4. В JCGM-106 показано, что в ситуации, когда pdf априорной величины и величины, получаемой при измерениях – нормальны, апостериорная pdf также нормальна с ожиданием y, представляющим собой средневзвешенную оценку, а стандартная неопределенность y всегда меньше, чем стандартные неопределенности исходных распределений.

5. Сравнение оценок, получаемых с использованием подходов, описанных в GUM и Приложених GUM-S1, GUM-S2, показывает их численное отличие, обусловленное различием в нахождении стандартных неопределенностей входных величин по типу A. Таким образом, после принятия GUM-S1 и GUM-S2, GUM больше не согласуется с ними, что поставило перед WG1 задачу его ревизии.

5. Литература

[1] JCGM 100:2008. Evaluation of measurement data – Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement. – JCGM, 2008. – 120 p.

[2] 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. − JCGM, 2008. − 88 p.

[3] JCGM 102:2011. Evaluation of measurement data − Supplement 2 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” − Extension to any number of output quantities. − JCGM, 2011. − 72 p.

[4] JCGM 104:2009. Evaluation of measurement

data – An introduction to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” and related documents − JCGM, 2009. − 28 p.

[5] JCGM 106:2012. Evaluation of measurement data – The role of the measurement uncertainty in conformity assestment. − JCGM, 2012. − 88 p.

[6] **Bich et al.** Revision of the «Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement»// Metrologia. − 2012, − Vol. 49, pp. 702–705.

[7] **W. Wöger.** Information-Based Probability Density Function for a Quantity // Measurement Techniques. − 2003, Volume 46, Issue 9, pp. 815-823.

[8] **Sergey V. Vodotyka, Igor P. Zakharov.** Application of Monte Carlo simulation for the evaluation of measurements uncertainty // Metrology and Measurement systems, 2008, vol., XV, Number 1 p. 118 – 123.

Данные для авторов:

Игорь Петрович Захаров. Образование – инженер-радиотехник (1978), Д.т.н. (2006), профессор (2007); профессор кафедры метрологии и измерительной техники Харьковского национального университета радиоэлектроники.

Олеся Анатольевна Боцюра. Образование – математик (1991), аспирант кафедры метрологии и измерительной техники Харьковского национального университета радиоэлектроники.

BAYESIAN APPROACH TO THE MEASUREMENT UNCERTAINTY EVALUATION IN JCGM’S DOCUMENTS

I. Zakharov, O.A. Botsiura

Kharkiv National University of Radio Electronics,
14 Lenina ave., Kharkiv, Ukraine, *newzip@ukr.net*

Resume: The report reviewed the history and prospects of development of JCGM documents for evaluation of measurement uncertainty. It is shown that the application of the Bayesian approach in these documents is a strategic objective of WG 1 JCGM. Realization of Bayesian approach in the current regulatory documents JCGM is reviewed. Contradictions between the GUM and these documents are shown.

Keywords: measurement uncertainty, probability density function, the law of propagation of distributions, the Bayesian approach, the Monte Carlo method.

References

[1] JCGM 100:2008. Evaluation of measurement data – Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement. – JCGM, 2008. – 120 p.

[2] 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. − JCGM, 2008. − 88 p.

[3] JCGM 102:2011. Evaluation of measurement data − Supplement 2 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” − Extension to any number of output quantities. − JCGM, 2011. − 72 p.

[4] JCGM 104:2009. Evaluation of measurement data – An introduction to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” and related documents − JCGM, 2009. − 28 p.

[5] JCGM 106:2012. Evaluation of measurement data – The role of the measurement uncertainty in conformity assestment. − JCGM, 2012. − 88 p.

[6] **Bich et al.** Revision of the «Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement»// Metrologia. − 2012, − Vol. 49, pp. 702–705.

[7] **W. Wöger.** Information-Based Probability Density Function for a Quantity // Measurement Techniques. − 2003, Volume 46, Issue 9, pp. 815-823.

[8] **Sergey V. Vodotyka, Igor P. Zakharov.** Application of Monte Carlo simulation for the evaluation of measurements uncertainty // Metrology and Measurement systems, 2008, vol., XV, Number 1 p. 118 – 123.

БАЙЕСОВ ПОДХОД ПРИ ОЦЕНЯВАНЕ НА НЕОПРЕДЕЛЕНОСТТА НА ИЗМЕРВАНИЯТА В ДОКУМЕНТИТЕ JCGM

И.П. Захаров, О.А. Боцюра
ХНУР, просп. Ленина,14, г. Харьков, Украина, *e-mail: newzip@ukr.net*

Резюме: В доклада са разгледани историята и перспективата на разработването на документите на JCGM за оценяване на неопределеността на измерването. Посочва се, че внедряването на байесовия подход в тези документи е стратегическа задача на WG 1 JCGM. Разгледана е реализацията на байесовия подход в действащите нормативни документи на JCGM. Посочват се противоречията с GUM относно тези документи.

Ключови думи: неопределеност на измерванията, плътност на разпределението на вероятността, закон за разпространението на разпределенията, байесовски подход, метод Монте-Карло.