

Zygmunt Lech WARSZA¹, Vladimir V. EZHELA²

¹ PRZEMYSŁOWY INSTYTUT AUTOMATYKI I POMIARÓW (PIAP), Al. Jerozolimskie 202, 02-486 Warszawa

² INSTYTUT FIZYKI WIELKICH ENERGII (IHEP), RosAtom, Protvino MR, Rosja

Zarys podstaw teoretycznych wyznaczania i numerycznej prezentacji wyników pomiarów pośrednich wieloparametrowych

Doc. dr inż. Zygmunt Lech WARSZA

Ukończył Miernictwo Elektryczne w Politechnice Warszawskiej 1959, doktorat 1967, docent od 1970. Pracował w Instytucie Elektrotechniki i Pol. Warszawskiej, obecnie w PIAP. Zorganizował i prowadził: Wydział Transportu Pol. Świętokrzyskiej, Ośrodek Aparatury Pomiarowej IMGW, Zakład Automatykacji i Techniki Pomiarowej Instytutu Chemii Przemysłowej. Wykładał metrologię i diagnostykę techniczną w Pol. Radomskiej. Autor około 130 publikacji, 2 monografii, 11 patentów oraz promotor 2 doktorów.

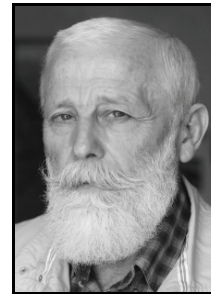
e-mail: zhw@op.pl



Dr Vladimir V. EZHELA

W 1968 ukończył Moskiewski Instytut Fizyki i Techniki (MPTI) ze specjalnością fizyka jądrowa. Od 1968 pracuje w Instytucie Fizyki Wielkich Energii IHEP. W 1971 odbył aspiranturę w MPTI pod kierunkiem akademika A. A. Logunova, od 1971 w pionie teoretycznym IHEP, 1977 – 2003 starszy pracownik naukowy, kierownik Centrum Danych Fizyki Cząstek (PPDC), 2004 – główny pracownik naukowy w PPDC IHEP. Autor kilkudziesięciu publikacji naukowych, współpracuje z CODATA.

e-mail: Vladimir.Ezhela@ihep.ru



Streszczenie

Jest to pierwsza z cyklu trzech publikacji o przetwarzaniu i poprawnym wyznaczaniu danych w pośrednich pomiarach wieloparametrowych. Przedstawiono metodę numerycznego szacowania estymatorów wartości, niepewności i współczynników korelacji skojarzonych ze sobą wielkości, czyli multi-mezurandu z użyciem algebry wektorów losowych wraz z przykładami. W części 2 wykaże się, że kilka związanych z tą dziedziną zaleceń przewodnika GUM i przykład H.2 wymaga zmian. Przedstawi się alternatywne rozwiązanie tego przykładu i reguły dla wyznaczania progów poprawnego zaokrąglania wyników pomiaru. W części 3 opisze się nieścisłości w danych podstawowych stałych fizycznych publikowanych w korektach CODATA do 2006 r. Jako kontynuacja bliskiego do ukończenia Suplementu 2 do GUM o wyrażaniu wyników pomiarów wieloparametrowych proponuje się stworzenie międzynarodowego standardu o przedstawianiu danych wieloparametrowych z wykorzystaniem e-publishing, który umożliwi ich numeryczną weryfikację, szerokie rozpowszechnianie i długotrwałe przechowywanie.

Słowa kluczowe: niepewność, pomiary pośrednie wieloparametrowe, multi-mezurand, dane skorelowane.

Outline of the theoretical background of evaluation and numerical presentation of the indirect multivariate measurement results

Abstract

This is the first of the three papers about conversion and proper evaluation of digital data in multidimensional indirect measurements. Theoretical backgrounds of the proper evaluation of the value estimators, uncertainties and correlation coefficients of jointed quantities with application of the random vectors algebra are shortly discussed, and two examples are given. In the next paper will be shown that few connected with this area recommendations and example H.2 of the international metrological guide GUM –ISO has some mistakes. Needed corrections will be given and formulas for rounding thresholds of numerical data will be presented. In the third paper it will be shown that in CODATA corrections including the last published in 2006, the data of fundamental physical constants are still partly corrupted. As continuation of the being in the final preparation stage Supplement 2 of GUM for evaluation of the multivariate measurement results are recommended introductory works on the international standard for numerical presentation and dissemination of multidimensional data with application of e-publishing offering full possibilities of peer review and the long time storage.

Keywords: uncertainty, indirect multidimensional measurements, multi-mezurand, correlated data.

1. Wstęp

W badaniach naukowych i technicznych oraz w procesach przemysłowych i badaniach środowiska często przeprowadza się równoczesne pomiary kilku wielkości o estymatorach powiązanych ze sobą statystycznie, tj. skorelowanych wskutek wspólnych

wpływów otoczenia i oddziaływań wewnętrznych w badanym obiekcie. Z pomiarów m wielkości bezpośrednio mierzonych (wejściowych) można wyznaczyć pośrednio innych n wielkości (wyjściowych), gdy znane są równania opisujące ich wzajemne zależności. W fizyce te n wielkości nazywa się obserwabami (ang. *observables*), a w metrologii – multi-mezurandem. Takie pomiary są wykonywane:

- w badaniach naukowych na pograniczu wiedzy,
- w metrologii o najwyższych dokładnościach przy określaniu podstawowych stałych fizycznych i innych danych odniesienia oraz wyznaczaniu wartości wzorców i jednostek wielkości pochodnych;
- w zaawansowanych badaniach technicznych, np.: przy identyfikacji „in situ” modeli obiektów sterowania, w odpowiedzialnych badaniach diagnostycznych i monitoringu urządzeń technicznych oraz środowiska w celu przeciwdziałania zagrożeniom ich uszkodzeń i zapewnienia bezpieczeństwa obsługi,
- w pomiarach przebiegu i jakości procesów oraz zasilania ich w energię w warunkach ruchowych.

W ocenie dokładności wyznaczanych pośrednio i powiązanych ze sobą wielkości należy uwzględniać występujące w eksperymencie składniki losowe mierzonych wielkości wejściowych i ich skorelowanie. Można wyróżnić dwa rodzaje wymagań dotyczących dokładności wyznaczania wartości i niepewności oraz współczynników korelacji wzajemnej wielkości wyjściowych wyznaczanych pośrednio z pomiarów w danym eksperymencie:

- wystarczy zapewnić niezbędną rozdzielczość i dokładność obliczeń parametrów mezurandu wyjściowego;
- należy dążyć do uzyskania możliwie jak największej dokładności obliczeń przy wyznaczaniu tych parametrów, aby informacji zdobytej w pomiarach nie utracić w procesie przetwarzania i zaokrąglania danych.

W pierwszym przypadku typowym dla pomiarów użytkowych, nieskorygowane błędy instrumentalne charakteryzowane łącznie przez niepewność typu B, zwykle dominują nad zakresem losowego rozrzutu pojedynczych wyników obserwacji. Dalsze zwiększanie już uzyskanej wystarczającej rozdzielczości i dokładności pomiaru każdej z wielkości wejściowych jest zbyteczne jako nieekonomiczne i nawet mogące powodować dezinformację.

W drugim z przypadków należy starannie wyeliminować wpływ wszystkich znanych oddziaływań, aby a priori nieznanne, ale zmienne pozostałości systematycznych błędów były dla wszystkich mierzonych wielkości jak najmniejsze. Jeśli pozostałości tych nie daje się już usunąć zarówno poprzez odpowiednie poprowadzenie eksperymentu (np. regularne próbkowanie), jak i w kolejnych obliczeniach i trzeba je traktować tak, jakby były losowe. Następnie przeprowadza się odpowiednio dużą liczbę obserwacji dla minimalizacji statystycznej składowej niepewności typu A. Największą możliwą do uzyskania dokładność i wiarygodność wyników w pomiarach pośrednich uzyskuje się wówczas poprzez odpowiednio dokładne przetwarzanie składowych loso-

wych sygnałów i końcową statystyczną obróbkę otrzymywanych danych. Dotyczy to w szczególności pomiarów w badaniach poznawczych na granicy wiedzy i przy wyznaczaniu wartości podstawowych stałych fizycznych przez czołowe ośrodki metrologiczne i publikowanych następnie jako dane odniesienia przez międzynarodową organizację CODATA.

Istniejące przepisy metrologiczne wraz z Przewodnikiem GUM [1] podają reguły wyrażania wyniku pomiarów tylko dla pojedynczej wielkości mierzonej, traktowanej tak, jakby miała rozkład normalny. Zaokrąglenia wartości liczbowej jej estymatora zaleca się dokonywać na miejscu dziesiętnym odpowiadającym jedno- lub dwu-cyfrowej niepewności pomiaru. Przepisy te nie obejmują jeszcze wieloparametrowych pomiarów pośrednich, ale poświęcony im Suplement 2 jest w końcowym stadium opracowywania. Zasady zaokrąglenia składowych multi-mezurandu są więc dotąd dowolne, zwykle przyjmowane tak, jak w pomiarach pojedynczej wielkości, a ich współczynniki korelacji bliskie 1. GUM zaleca podawać do 3 cyfr po przecinku. Prowadzi to do zniekształceń przy przetwarzaniu danych oryginalnych w pomiarach wieloparametrowych.

Celem tej pracy jest przybliżenie środowisku metrologicznemu metody stosowanej w fizycznych wieloparametrowych eksperymentach poznawczych do wyznaczania danych liczbowych parametrów mierzonych pośrednio multi-mezurandów [3-5]. Istotą tej metody jest zminimalizowanie zniekształceń i strat informacji pierwotnej zdobytej w pomiarach. Prowadzi to do konieczności wyznaczania współczynników korelacji i niepewności z większą liczbą cyfr znaczących niż według GUM. Metodę tę po niezbędnym zmodyfikowaniu, można by wykorzystywać szeroko do wyznaczania dokładności pomiarów wieloparametrowych i w metrologii i w badaniach użytkowych o mniejszej dokładności oraz do opisu parametrów i wymagań technicznych dla przyrządów i systemów pomiarowych realizujących automatycznie takie pośrednie pomiary.

Niepewności pomiarów wieloparametrowych omawiano częściowo w literaturze przy ocenie dokładności modeli obiektów [8] oraz tylko teoretycznie, tj. bez odpowiedniej ilustracji numerycznej [9], lub też dla ograniczonego rodzaju przypadków [9, 10, 14].

W tej pracy przedstawi się w zarysie podstawy teoretyczne opisu dokładności multi-mezurandu za pomocą algebry wektorów losowych wraz z przykładami.

2. Opisy multi-mezurandu

Minimalna struktura danych numerycznych, która służy do wyrażania wyniku dowolnej pojedynczej losowej wielkości mierzonej (mezurandu skalarnego), zawiera punkt skupienia danych pomiarowych jako estymator jej wartości i przedział ufności, czyli zakres rozrzutu wartości obserwacji pomiarowych o określonym prawdopodobieństwie ich występowania. Dla skalarnej wielkości mierzonej jako estymator stosuje się zwykle wartość średnią, chociaż próbki danych modelowane niektórymi rozkładami niegaussowskimi, np. równomiernym czy trapezowym, mogą mieć inne dokładniejsze estymatory. Przedziały ufności o zadanym prawdopodobieństwie wyznacza się w wartościach odchylenia standardowego.

Szacowanie wyników pomiarów wielu wielkości mierzonych równocześnie we wspólnym eksperymencie, czyli multi-mezurandu, jest bardziej złożone, gdyż rozrzuty danych jego składników są powiązane. Poza estymatorami wartości wielkości wyjściowych należy wyznaczyć ich niepewności z uwzględnieniem wzajemnego skorelowania. Nawet wyniki poszczególnych pomiarów każdej z m wielkości wejściowych mogą być ze sobą powiązane statystycznie (autokorelacja), a estymatory tych wielkości - skorelowane wzajemnie. Są one statystycznie niezależne tylko w przypadkach szczególnych, np. gdy sąsiednie w kolejności wykonywania wyniki pomiarów pojedynczej wielkości nie zależą od siebie, zaś różne wielkości wejściowe mierzy się w osobnych eksperymentach.

Z pomiarów m wielkości wejściowych można wyznaczyć pośrednio n wielkości wyjściowych powiązanych z nimi układem n równań. Od postaci tych funkcji zależy geometria obszaru opisującego łącznie rozrzuty wyników pomiarów. Gdy n badanych

wielkości losowych traktuje się tak, jakby miały rozkłady równomierne i ich wartości uzyskano w niezależnych eksperymentach, to obszar rozrzutu danych opisuje się wówczas n -wymiarowym hiper-prostokątem o bokach równoległych do osi składowych multi-mezurandu. Koniec wektora średniego znajduje się w środku tej bryły, a boki hiper-prostokąta są przedziałami ufności o określonej stałej gęstości prawdopodobieństwa $p(x_i)=const$, jednakowej dla wszystkich elementów multi-mezurandu. Otrzymane z pomiarów szerokości przedziałów mogą różnić się liczbą cyfr znaczących. Ujednolica się je podając w wartościach standardowego odchylenia σ , bądź w %.

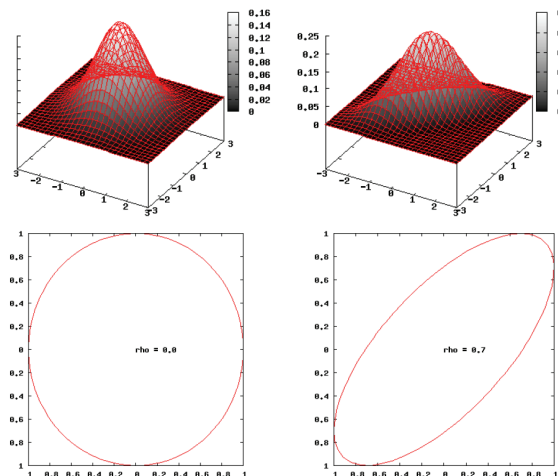
Prostopadłościowy kształt obszaru rozrzutu danych pomiarowych nie jest jednak właściwym modelem dla wielkości skomplikowanych statystycznie w eksperymencie pomiarowym, gdyż nie uwzględnia ich skorelowania. Rozrzut danych multi-mezurandu należy wówczas opisywać wspólnym n -wymiarowym rozkładem prawdopodobieństwa o n wielkościach mierzonych jako współrzędnych. Gdy każda z tych wielkości ma rozkład normalny, to i rozkład n -wymiarowy też będzie normalny.

Dla dwu parametrów w prostokątnym układzie współrzędnych x, y

$$p(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho_{xy}^2}} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho_{xy}^2)}\left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} - \frac{2\rho_{xy}xy}{\sigma_x\sigma_y}\right)\right) \quad (1)$$

gdzie: σ_x^2, σ_y^2 - wariancje, $\rho_{x,y} = E(x-\bar{x})(y-\bar{y})$ - współczynnik korelacji, \bar{x}, \bar{y} - wartości średnie.

Postacie rozkładu (1) dla dwu wartości współczynnika korelacji ρ_{xy} i przebiegi linii o stałej gęstości prawdopodobieństwa $p(x,y)=const$ podano na rysunku 1.



Rys. 1. Dwuwymiarowy rozkład gęstości prawdopodobieństwa $p(x,y)$ dla dwu współczynników korelacji: $\rho_{xy}=0$ oraz $\rho_{xy}=0,7$. Poniżej – przykłady linii granicznej obszaru rozrzutu danych o $p(x,y)=const$ [7]

Fig. 1. Two-parameter PDF-s $p(x,y)$ of correlation coefficient $\rho_{xy}=0$ and $\rho_{xy}=0,7$. Below: border line of data dispersion space for $p(x,y)=const$ [7]

Równanie linii granicznej rozrzutu danych o stałej gęstości prawdopodobieństwa $p(x,y)=const$ wyznacza się z (1) przez przyrównanie wykładnika do wartości stałej. Dla 0,5 otrzymuje się

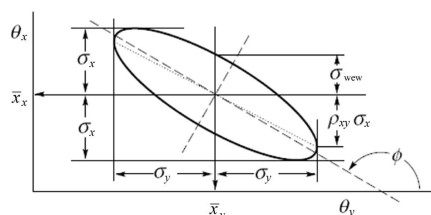
$$\frac{(x-\bar{x})^2}{\sigma_x^2} - 2\rho_{xy} \frac{(x-\bar{x})}{\sigma_x} \frac{(y-\bar{y})}{\sigma_y} + \frac{(y-\bar{y})^2}{\sigma_y^2} = 1 - \rho_{xy}^2 \quad (2)$$

Jest to równanie elipsy o środku położonym w końcu wektora średniego $[\bar{x}, \bar{y}]^T$ i wpisanej w prostokąt $\pm\sigma_x, \pm\sigma_y$. Wartości średnie \bar{x}, \bar{y} , obie wariancje σ_x^2, σ_y^2 i współczynnik korelacji ρ_{xy} oblicza się z wyników pomiarów w znany powszechnie spo-

sób. Przy $\sigma_x \neq \sigma_y$ i braku skorelowania ($\rho_{xy} = 0$) (lewa figura), osie elipsy wpisanej w prostokąt są równoległe do boków $2\sigma_x$, $2\sigma_y$ prostokąta. Dla współczynnika korelacji $0 < |\rho_{xy}| \leq 1$, dłuższa oś elipsy jest nachylona do osi odciętych x pod kątem

$$\phi = \frac{1}{2} \arctg 2 \rho_{xy} \frac{\sigma_x \sigma_y}{\sigma_x^2 - \sigma_y^2}.$$

Taką elipsę dla $\rho_{xy} = +0,7$ przedstawia dolna prawa figura z rys. 1, a dla ujemnego ρ_{xy} otrzymywanego gdy $\sigma_y^2 > \sigma_x^2$ - rys. 2 [12].



Rys. 2. Zależności dla elipsy gęstości $p(x,y) = const$ i o współczynniku korelacji $\rho_{xy} < 0$
Fig. 2. Formulas for ellipse of $p(x,y) = const$ and of the of correlation coefficient $\rho_{xy} < 0$

Punkty styczności elipsy z bokami prostokąta $\pm\sigma_y$, $\pm\sigma_x$ są odległe od osi układu x , y położonego w środku elipsy odpowiednio o $x_0 = \pm\rho_{xy}\sigma_x$ i o $y_0 = \pm\rho_{xy}\sigma_y$. Przy pełnej korelacji, tj. gdy $\rho_{xy} = \pm 1$ elipsa degeneruje się do jednej z przekątnych prostokąta.

Równanie elipsy z rys. 2 jako krzywej drugiego stopnia [4] w układzie współrzędnych x , y w jej środku to

$$a_{11}x^2 + 2a_{12}xy + a_{22}y^2 + a_{33} = 0$$

Pierwsze trzy składniki stanowią formę kwadratową dodatnio określoną o równaniu charakterystycznym

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + a_{11}a_{22} - a_{12}^2 = 0$$

i pierwiastkach

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2}(a_{11} + a_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}^2)} \geq 0$$

spełniających zależności

$$\lambda_1 + \lambda_2 = a_{11} + a_{22} \quad \lambda_1 \cdot \lambda_2 = a_{11}a_{22} - a_{12}^2$$

Długości półosi pochylonej elipsy wynoszą [4]:

$$a^2 = -\frac{a_{33}}{\lambda_2} \quad b^2 = -\frac{a_{33}}{\lambda_1}$$

Dla trzech lub więcej skojarzonych losowo wielkości mierzonych i przy przetwarzaniu ich danych opis analityczny rozkładu wielowymiarowego, nawet dla m -normalnego, komplikuje się. Bardzo przydatnym matematycznym narzędziem do opisu i analizy wielu wielkości skojarzonych o rozkładach normalnych jest algebra wektorów losowych [6] - [13]. W pomiarach pośrednich zbiór danych wielkości wejściowych x_i przedstawiony jako m -elementowy wektor losowy $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_m]^T$ przekształca się w multimezurand wyjściowy opisany n -elementowym wektorem $\mathbf{Y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$. Są one powiązane układem n równań zapisanym ogólnie jako:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{F} \mathbf{X} \quad (3)$$

W szczególnym przypadku przekształcenia liniowego i afinicznego (tj. z dodanymi wartościami stałymi) otrzymuje się liniowy układ równań, a operator \mathbf{F} jest macierzą o wymiarach $m \times n$.

Podstawowa struktura do liczbowego oszacowania multimezurandu powinna zawierać wektor średni o n -składowych oraz opis granicy obszaru jego rozrzutu o zadanej gęstości prawdopodobieństwa $p(x_1, \dots, x_n)$. Dla n -wymiarowego rozkładu Normalnego jest to n -wymiarowa hiper-elipsoida. W jej środku znajduje się koniec wektora wartości średnich, zwanego krócej wektorem średnim. Hiper-elipsoidę określa analitycznie macierz kowariancji \mathbf{c} o wymiarach $n \times n$. Jest ona powiązana analitycznie z macierzą korelacji $\boldsymbol{\rho}$, nazywaną w skrócie korelatorem i macierzą diagonalną odchyleń standardowych $\boldsymbol{\sigma}$. Dla \mathbf{X} jest to równanie

$$\mathbf{c}_X = \boldsymbol{\sigma}_X \boldsymbol{\rho}_X \boldsymbol{\sigma}_X^T \quad (4)$$

$$\text{gdzie: } \boldsymbol{\sigma}_X = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_m \end{bmatrix}; \boldsymbol{\rho}_X = \begin{bmatrix} 1 & \rho_{21} & \dots & \rho_{m1} \\ \rho_{12} & 1 & \dots & \rho_{m2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \rho_{1m} & \rho_{2m} & \dots & 1 \end{bmatrix}; \rho_{ij} = \rho_{ji}$$

Obie macierze powinny być pół-określone dodatnio [6], czyli mieć dodatnie, lub równe zero wartości własne $\lambda_i \geq 0$. Są to pierwiastki równania charakterystycznego dowolnej macierzy

$$\det[\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}] = 0 \quad (4a)$$

Jeśli elementy macierzy \mathbf{A} są liczbami rzeczywistymi to jej wartości własne też są rzeczywiste.

Macierze kowariancji \mathbf{c}_Y i \mathbf{c}_X wektorów wyjściowego i wejściowego są powiązane równaniem

$$\mathbf{c}_Y = \mathbf{S} \mathbf{c}_X \mathbf{S}^T \quad (5)$$

gdzie: macierz współczynników wrażliwości

$$\mathbf{S} \equiv \frac{\partial(\mathbf{Y})}{\partial(\mathbf{X})} \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1}, & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_m} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1}, & \dots & \frac{\partial y_m}{\partial x_m} \end{bmatrix}$$

Korelator wielkości wyjściowych $\boldsymbol{\rho}_Y$ otrzymuje się bezpośrednio z macierzy kowariancji \mathbf{c}_Y , lub przekształcając korelator wejściowy $\boldsymbol{\rho}_X$ według (5). Jeśli któraś z wielkości ma niegaussowski rozkład, lub przetwarzanie jest nieliniowe, to obszar rozrzutu jest o kształcie innym niż elipsoida i do jego opisu trzeba stosować inne funkcje, w tym kopuły (ang. copulas) [7]).

W przypadku dwuparametrowym, wyniki o rozkładzie (1) można przedstawić jedną z dwu równoważnych struktur macierzowych: wektorem średnim i macierzą kowariancji $\mathbf{c}_Y \equiv \mathbf{c}_{xy}$ lub wektorem średnim z niepewnościami i korelatorem \mathbf{r}_{xy} .

$$\left(\begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \sigma_x^2 & \sigma_x \sigma_y \cdot \rho_{xy} \\ \sigma_x \sigma_y \cdot \rho_{xy} & \sigma_y^2 \end{bmatrix} \right) \Rightarrow \left(\begin{bmatrix} \bar{x} \pm \sigma_x \\ \bar{y} \pm \sigma_y \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & \rho_{xy} \\ \rho_{xy} & 1 \end{bmatrix} \right) \quad (6)$$

Równanie charakterystyczne macierzy \mathbf{c}_{xy} ma postać

$$\det|\mathbf{c}_{xy} - \lambda \mathbf{1}| = \lambda^2 - (\sigma_x^2 + \sigma_y^2)\lambda + \sigma_x^2 \sigma_y^2 (1 - \rho_{xy}^2) = 0 \quad (6a)$$

a jej wartości własne, czyli pierwiastki tego równania

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\sigma_x^2 + \sigma_y^2)^2 - 4\sigma_x^2 \sigma_y^2 (1 - \rho_{xy}^2)} \quad (6b)$$

W przypadkach krańcowych: dla $\rho_{xy}=0$ elipsa jest położona poziomo, a pierwiastki (6a) $\lambda_1 = \sigma_x^2$, $\lambda_2 = \sigma_y^2$ są kwadratami obu średnic; zaś dla $|\rho_{xy}|=1$ elipsa staje się jedną z przekątnych prostokąta, gdyż $\lambda_2 = 0$, a $\lambda_1 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$. Dla $0 \leq \rho_{xy} \leq 1$ pierwiastki spełniają warunek $\lambda_{1/2} \geq 0$, a długości średnic pochylonej elipsy wynoszą [4]:

$$a^2 = -\frac{1-\rho_{xy}^2}{\lambda_2}, \quad b^2 = -\frac{1-\rho_{xy}^2}{\lambda_1}$$

Dotyczy to też równania $(1-\lambda)^2 - \rho_{xy}^2 = 0$ dla macierzy korelacji ρ_{xy} . Jej elipsa o półosiach $(1 \pm \rho_{xy})^{-1}$ wpisana jest w kwadrat ± 1 i styczna w $\pm \rho_{xy}$, a pierwiastki $\lambda_{1/2} = 1 \pm \rho_{xy} \geq 0$. Obie macierze \mathbf{c}_{xy} , \mathbf{r}_{xy} są więc pół-określone dodatnio.

Ilustrację transformacji liniowej dwu wielkości losowych wraz z danymi liczbowymi zawiera przykład 1.

Przykład 1

Z danych pomiarowych wielkości wejściowych ζ, η o dwuparametrowym rozkładzie Normalnym należy wyznaczyć mezurand wyjściowy o dwu składowych x, y jako ich sumę i różnicę. Ta liniowa operacja ma postać wektorową

$$\begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \end{bmatrix} = \mathbf{S} \begin{bmatrix} \bar{\zeta} \\ \bar{\eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\zeta} \\ \bar{\eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\zeta} + \bar{\eta} \\ \bar{\zeta} - \bar{\eta} \end{bmatrix}$$

Standardowe niepewności każdej ze składowych wektora wyjściowego $[x, y]^T$ otrzymana się znaną metodą liniowej propagacji niepewności. Są one ze sobą skojarzone statystycznie. Ich współczynnik korelacji ρ_{xy} znajduje się z (4) - (6)

$$\mathbf{c}_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_\zeta^2 & \sigma_\zeta \sigma_\eta \rho_{\zeta\eta} \\ \sigma_\zeta \sigma_\eta \rho_{\zeta\eta} & \sigma_\eta^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_x^2 & \sigma_x^2 - \sigma_\eta^2 \\ \sigma_x^2 - \sigma_\eta^2 & \sigma_y^2 \end{bmatrix}$$

gdzie: $\sigma_x = \sqrt{\sigma_\zeta^2 + \sigma_\eta^2 + 2\sigma_\zeta \sigma_\eta \rho_{\zeta\eta}}$, $\sigma_y = \sqrt{\sigma_\zeta^2 + \sigma_\eta^2 - 2\sigma_\zeta \sigma_\eta \rho_{\zeta\eta}}$

Elementy niediagonalne macierzy kowariancji \mathbf{c}_{xy} nie zależą od $\rho_{\zeta,\eta}$. Z \mathbf{c}_{xy} wyznacza się korelator

$$\rho_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & \rho_{xy} \\ \rho_{xy} & 1 \end{bmatrix}$$

gdzie: $\rho_{xy} = \frac{\sigma_\zeta^2 - \sigma_\eta^2}{\sigma_x \sigma_y}$ - współczynnik korelacji zależny od $\rho_{\zeta,\eta}$,

który występuje we wzorach dla σ_x i σ_y .

Przy nieskorelowanych składowych wektora wejściowego $[\zeta, \eta]^T$, tj. dla $\rho_{\zeta,\eta} = 0$, macierz \mathbf{c}_{xy} upraszcza się

$$\mathbf{c}_{xy} = \begin{bmatrix} \sigma_\zeta^2 + \sigma_\eta^2 & \sigma_\zeta^2 - \sigma_\eta^2 \\ \sigma_\zeta^2 - \sigma_\eta^2 & \sigma_\zeta^2 + \sigma_\eta^2 \end{bmatrix}$$

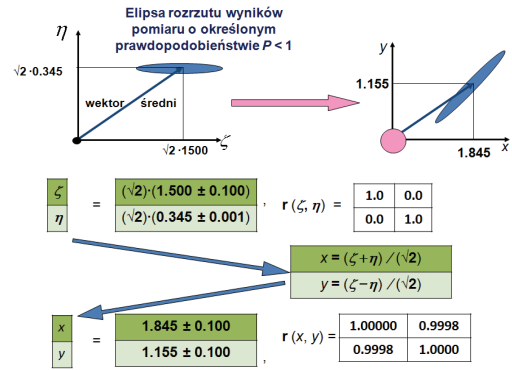
i wówczas:

$$\sigma_x = \sigma_y = \sqrt{\sigma_\zeta^2 + \sigma_\eta^2}, \quad \text{oraz} \quad \rho_{xy} = \frac{\sigma_\zeta^2 - \sigma_\eta^2}{\sigma_\zeta^2 + \sigma_\eta^2}$$

Na rys. 3 u góry przedstawiono schematycznie operację przekształcania wektora wejściowego, a poniżej dane liczbowe obu wektorów. Gdy dane te są obliczonymi z pomiarów estymatorami, parametrów populacji σ i ρ , to używa się oznaczeń s i r , a dla korelatora \mathbf{r} . Pomimo, że wielkości wejściowe ζ, η nie były skorelowane, to z otrzymanych wartości elementów korelatora $\mathbf{r}(x, y)$ wynika,

że niepewności składowych wyjściowego wektora są silnie ze sobą skorelowane. Zaokrąglenie wartości niediagonalnych elementów tego korelatora do 3 cyfr znaczących, jak to zaleca się w punkcie 7.2.6 Przewodnika GUM, spowodowałoby degenerację elipsy o $\rho_{xy}=1$ do przekątnej prostokąta, tj. do całkowicie deterministycznej współzależności niepewności obu składowych.

Ujęcie wektorowe można również stosować w analizie i prognozowaniu losowo traktowanych błędów granicznych pomiarów wieloparametrowych. Jeśli nie daje się a priori oszacować ilościowo wartości ich współczynników korelacji, to gdy mogą one być duże, przyjmuje się wartości równe 1 i przewidywane znaki, bądź najniekorzystniejszy ich wariant. Natomiast, gdy korelacja może być niewielka, zakłada się jej współczynniki równe zeru.



Rys. 3. Przykład liniowego przekształcania wektora losowego $[\zeta, \eta]^T$ w dwuelementowy wektor $[x, y]^T$ wraz z oszacowaniem niepewności i macierzy korelacji $\mathbf{r}(x, y)$

Fig. 3. Example of linear transformation of the random vector $[\zeta, \eta]^T$ to the vector $[x, y]^T$ together with estimation of its uncertainty and correlation matrix $\mathbf{r}(x, y)$

3. Zniekształcanie wyników pomiarów przez nadmierne zaokrąglenie

Najprostszą, powszechnie stosowaną transformacją danych pomiarowych jest zaokrąglenie wyrażen liczbowych estymatorów ich wartości średnich oraz elementów macierzy kowariancji lub niepewności i współczynników korelacji. Jest to operacja nieliniowa, którą dla skojarzonych danych wieloparametrowych można obecnie dokonywać dowolnie, gdyż w metrologii prawnej nie ma jeszcze żadnych zaleceń - jak poprawnie zaokrąglać dane multi-mezurandu.

Estymatory wartości, niepewności i współczynników korelacji mierzonego pośrednio mezurandu \mathbf{Y} są ze sobą powiązane poprzez ich zależności od parametrów mezurandu wejściowego \mathbf{X} . Zalecane w GUM niezależne zaokrąglenie składowych wektora i elementów macierzy korelacji może dać wynik niepoprawny. Dla wyników badań w fizyce oraz do wyznaczania wartości i dokładności stałych fizycznych V. Ezhela zaproponował [3], aby konsekwentnie stosować zasadę zachowywania dodatniej pół-określoności macierzy kowariancji i korelacji przy wszelkich przekształcaniach i aby utrzymywać koniec zaokrąglanego wektora wewnątrz otrzymywanego obszaru rozrzutu przy przekształcaniu wejściowych niezaokrąglonych danych pomiarowych. W literaturze naukowej jest wiele przykładów takich prezentacji wyników pomiarów i ich oszacowań oraz procedur wymiany danych, które nie spełniają tych wymagań - patrz [4] i uwagi oznaczone ■ na końcu [5]. Na rysunku 4 pokazano konsekwencje różnych zniekształceń dla początkowo poprawnych oszacowań wyniku mezurandu jako wektora $[x, y]^T$ o wartościach składowych z rysunku 3.

Są to następujące przypadki:

- 2 - zignorowanie korelacji,
 - 3 - zaokrąglenie elementów korelatora do 3 cyfr po przecinku według zalecenia GUM,
 - 4 - zaokrąglenie ostatniej jednej lub dwu cyfr znaczących dla wartości średnich składowych wektora i ich niepewności, dokonane według zaleceń GUM dla mezurandu skalarnego.
- Przypadki te oszacowano liczbowo poniżej względem wartości poprawnych dla surowych danych pomiarowych z Przykładu 1.

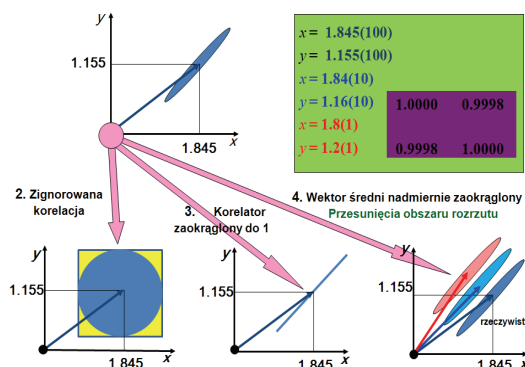
Przykład 2

Wyniki pomiarów pośrednich mezurandu Y według rys. 3:

$$Y = [1,845(100); 1,155(100)]$$

4a. Zaokrąglenie pojedynczej ostatniej cyfry: $Y_1 = [1,84(10); 1,16(10)]$.

Wektor różnicy: $\Delta Y_1 = Y_1 - Y = [-0,005; 0,005]$.



Rys. 4. Przykłady nieprawidłowego przedstawiania danych skorelowanych
Fig. 4. Examples of not proper presentation of correlated two-parameter data

4b. Zaokrąglenie dwu ostatnich cyfr: $Y_2 = [1,8(10); 1,16(10)]$.

Wektor różnicy: $\Delta Y_2 = Y_2 - Y = [-0,045; 0,045]$.

W analizie macierzowej wektorów losowych do oceny położenia końca wektora zaokrąglonego względem centrum elipsoidalnego obszaru rozproszenia stosuje się miarę odległości χ według Mahalanobisa [13]. Dla wektora 2-elementowego otrzymuje się formę kwadratową

$$\chi^2 = \Delta Y \cdot \frac{1}{\sigma_x \sigma_y} \cdot \mathbf{r}(x, y)^{-1} \cdot \Delta Y^T \quad (7)$$

W miarze tej różnice ΔY współrzędnych wektora i środka elipsy są odniesione do odchyłeń średnich standardowych σ_x , σ_y . Dla elipsy stycznej wewnątrznie do boków $\pm(\sigma_x, \sigma_y)$ jest $\chi^2 = 1$.

Dla przypadków 4a i 4b zaokrąglenia wektora Y otrzymano:

$$\chi_1^2 = [-0,005; 0,005] \frac{1}{0,01} \frac{1}{1-0,9998^2} \begin{bmatrix} 1 & -0,9998 \\ -0,9998 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0,005 \\ 0,005 \end{bmatrix} = 25 \gg 1$$

$$\chi_2^2 = [-0,045; 0,045] \frac{1}{0,01} \frac{1}{1-0,9998^2} \begin{bmatrix} 1 & -0,9998 \\ -0,9998 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0,045 \\ 0,045 \end{bmatrix} = 2025 \gg 1!$$

Oba zaokrąglone wektory średnie wychodzą znacznie poza obszar rozproszenia pierwotnych, tj. niezaokrąglonych danych na wiele odchyłeń standardowych. Autorzy często jednak obszar ten wiążą błędnie z końcem zaokrąglonego wektora – jak to pokazuje rys.4. Tak więc zaokrąglenie składowych wektora średniego i ich niepewności według aktualnych zaleceń GUM jak dla mezurandu skalarnego może dać niepoprawny rezultat. Błąd ten trudno jest wykryć i skorygować bez dostępu do danych oryginalnych. Stąd wynika, że potrzebna jest możliwie szybka normalizacja procedury zapisu danych mierzonych i przetwarzanych oraz sposobu ich zaokrąglania w pomiarach wieloparametrowych.

4. Podsumowanie

Omówiono w zarysie propagację niepewności oraz zasady prawidłowego przedstawiania wyników wieloparametrowych pomiarów pośrednich zbioru obserwowanych wielkości skójarzonych ze sobą deterministycznie i statystycznie, czyli multi-mezurandu [3, 5, 6]. Zaokrąglenia wartości średnich, niepewności i współczynników korelacji składowych tego mezurandu są ze sobą powiązane. Dla wielkości modelowanych wieloparametrowym rozkładem Normalnym bardzo przydatnym w praktyce narzędziem matematycznym jest algebra wektorów losowych. Jest to podejście stosowane do szacowania wyników eksperymentów w fizyce i w metrologii o najwyższej dokładności - przy wyznaczaniu wartości liczbowych jednostek miar i podstawowych stałych fizycznych.

Zestaw danych do poprawnego wyrażenia i oszacowania wyniku pomiaru wielkości wektorowej powinien zawierać:

- wektor średni, tj. wartości średnie współrzędnych,
- wektor odchyłeń standardowych tych wartości,
- dodatnio określoną macierz korelacji,
- minimalną wartość własną macierzy korelacji,
- informację o precyzji użytej do maszynowego obliczania wartości własnych macierzy korelacji.

Przy posługiwaniu się taką strukturą nie można rutynowo korzystać z procedur opracowanych i znormalizowanych dla pojedynczego pomiaru. W pracach [3-5] zaleca się, aby w procedurach przetwarzania wyników zmierzonych danych śledzić zmiany granic obszaru rozrzutu i powiązanie wektora średniego z tym obszarem, tj. sprawdzać czy jego wierzchołek nadal leży wewnątrz obszaru rozproszenia przetworzonych, ale niezaokrąglonych danych.

Pomiary wieloparametrowe występują też coraz powszechniej w różnych badaniach technicznych i użytkowych. Wyznaczanie i zaokrąglenie wyników takich pomiarów i sposób numerycznej prezentacji danych jest obecnie dowolny, nie objęty żadnymi normami, ani zaleceniami. Od dłuższego czasu dla metrologii i szerszej praktyki pomiarowej opracowywany jest poświęcony tym zagadnieniom Supplement 2 do GUM. Można żywić nadzieję, że wykorzystana się w nim doświadczenia ze stosowania procedur numerycznego przetwarzania i zaokrąglania danych w eksperymentach fizycznych by opracować jak najprostsze rozwiązania.

Zarówno w fizyce jak i w metrologii oraz wszędzie, gdzie stosuje się zautomatyzowane elektroniczne systemy do pomiarów wieloparametrowych konieczna jest standaryzacja sposobu opisu dokładności oraz wyznaczania i prezentacji wyników pomiarów z wykorzystaniem współczesnej statystyki matematycznej. Należałoby stopniowo wdrażać opisy uniwersalne, takie jak algebra wektorów losowych, lub jeśli to będzie konieczne - inne wyspecjalizowane narzędzia matematyczne dla przypadków szczególnych. Można tu będzie np. zastosować statystykę na powierzchniach krzywoliniowych [2] oraz teorię kopuł [7].

5. Literatura

- [1] Guide to the expression of uncertainty in measurement, ISO/IEC Guide 98:1995, 2nd ed. (Wyrażanie Niepewności Pomiaru Przewodnik - tłumaczenie J. Jaworskiego, GUM- Alfavero Warszawa 2002).
- [2] Pennes X.: Intrinsic Statistics on Riemannian Manifolds: Basic Tools for Geometric Measurements, Journal of Math., Imaging and Vision 25, 2006.
- [3] Ezhela V.: A multi-measurand ISO GUM supplement is urgent. CODATA DSJ, 6 S676-S789 [Errata: DSJ, 7(2007) E2-].
- [4] Ezhela V.: Comments on some clauses of GUM which provoking the incorrect presentation of measured data in scientific literature. Materiały Kongresu Metrologii KM 2010 (tekst na CD i abstrakt PL), Pol. Łódzka.
- [5] Ezhela V.: Physics and metrology. Materiały Kongresu Metrologii KM2010 (tekst na CD i abstrakt PL), Pol. Łódzka.
- [6] Korn G.A., Korn T.M.: Mathematical book for scientists and engineers. McGraw-Hill Book Co, New York 1968, dział 2.
- [7] Pawłowski J.: Wprowadzenie do teorii kopuł. Kraków, 2009, Internet.
- [8] Gajda J., Szyper M.: Modelowanie i badania symulacyjne systemów pomiarowych. AGH +Jartek s.c. Kraków, 1998 (rozdz. 7, s.335-408).
- [9] Muciek A.: Matematyczny model propagacji niepewności w pomiarach pośrednich. Materiały Sympozjum PPM'03 Podstawowe Problemy Metrologii, Konferencje nr 5, Oddz. PAN Katowice, 2003, s. 593-604.
- [10] Catelani M., Ciani L., Zanobini A.: Some remarks on a bivariate analysis in the propagation of measurement uncertainty as an alternative approach to the Monte Carlo method. CD Proc. of 17th Symp. IMEKO TC 4, 3rd Symp. IMEKO TC19 Sept. 8-10 2010, Kosice, Slovakia, paper 82.
- [11] Warsza Z.L., Ezhela V.: O konieczności standaryzacji metod opisu i publikowania rezultatów wieloparametrowych pomiarów. PAKGoś nr 4 2010.
- [12] Nakamura K. et al.: Particle Data Group. Review of Particle Physics J. Phys. G 37, 075021, July 2010 (see section 33. Statistics by G. Cowan), <http://pdg.lgl.gov>
- [13] Mahalanobis distance. Wikipedia, the free encyclopedia.
- [14] Krystek M.P.: From Univariate to Multivariate Uncertainty Calculations. PTB Internet.