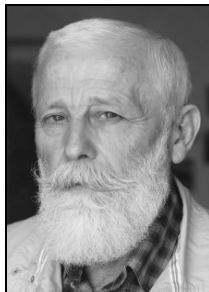


Vladimir V. EZHELA¹, Zygmunt Lech WARSZA²¹ INSTYTUT FIZYKI WIELKICH ENERGII (IHEP), Protvino MR Rosja² PRZEMYSŁOWY INSTYTUT AUTOMATYKI I POMIARÓW (PIAP), 02-486 Warszawa, Al. Jerozolimskie 202

Nieścisłości stałych podstawowych i propozycja standaryzacji dualnego sposobu publikowania wyników pomiaru multi-mezurandu

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

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. Następnie zorganizował i prowadził: Wydział Transportu Pol. Świętokrzyskiej, Ośrodek Aparatury Pomiarowej IMGW, Zakład Automatykacji i Techniki Pomiarowej Instytutu Chemii Przemysłowej. Obecnie pracuje w Przemysłowym Instytucie Automatyki i Pomiarów PIAP. Autor około 130 publikacji, 2 monografii, 11 patentów oraz promotor 2 doktorów.



e-mail: zlw@op.pl

Streszczenie

Po wprowadzeniu scharakteryzowano rolę pomiarów wieloparametrowych w metrologii, nauce, edukacji i dziedzinach gospodarczych. Omówiono nieścisłości w korektach danych podstawowych stałych fizycznych opublikowanych przez CODATA. Jako rozwinięcie opracowywanego Suplementu 2, który rozszerzy zalecenia przewodnika GUM-2008 o wyrażanie wyników pomiarów wieloparametrowych (multi-mezurandu), zaproponowano podjęcie prac nad standaryzacją przedstawiania wyników pomiarów w dualnej formie: na papierze i za pomocą e-publishing. Podano centra światowe będące prekursorami takiego gromadzenia danych.

Słowa kluczowe: pomiary multi-mezurandu, stałe podstawowe, publikowanie danych skorelowanych, e-publikacje.

Inaccuracy of fundamental constants and proposal of the dual publication form of multi-measurand data

Abstract

In this paper the current unsatisfactory situation concerning quality of correlated quantities data obtained from multi-parameter measurements and their exchange in physics, metrology, economy and education is discussed. It is argued that, due to the advent of e-publishing, it is time to change the form of scientific and technical publications reporting measured or evaluated data. Namely: any paper publication reporting the measured data should be associated with file(s) containing complete set of numerical data which comprise the result reported. These data files associated with publication, being properly standardized, will give publishers possibility to deploy the "numerical peer review" to assure the quality of the numerical data and to organize the stable stewardship of the numerical data as they do with textual and graphical information. It is expected that such a form of scientific publication will greatly reduce the number of papers presenting the corrupted measured data and from the other side will simplify data exchange inside the community. It also will assure the quality of preserved data and knowledge for future generations. In multivariable measurements urgently is needed standardization of the evaluation method and dual measurement data presentation - on the paper and by e-publishing. That allows full numerical review of the multidimensional data, wide dissemination and unlimited in time storage.

Keywords: measurement of multi-measurand, fundamental constancies, correlated data evaluation, e-publishing.

1. Wprowadzenie

W nauce, szczególnie w dyscyplinach eksperymentalnych oraz w technice i w wielu dziedzinach gospodarczych coraz szerzej pozyskuje się i wykorzystuje dane z jednoczesnych pomiarów wieloparametrowych, czyli wyniki pomiarów multimezurandu. W publikacjach naukowych i innych oraz w zasobach danych o otwartym dostępie wyrażanie i przekazywanie informacji o wartościach wielkości powiązanych ze sobą wynikami pomiarów wieloparametrowych i wielkości szacowanych pośrednio na

podstawie tych wyników bywa dalekie od tzw. „dobrej praktyki” zapewniającej wysoką jakość i pełną wiarygodność metrologiczną. Wiele przykładów złej jakości pomiarowych danych zamieszczono w [16] jako krótkie komentarze do szeregu pozycji literatury. Ta analiza danych pomiarowych z publikacji zamieszczonych w czołowych, recenzowanych czasopismach naukowych o wysokim *impact factor* pokazuje, że obecna praktyka tworzenia, przekazywania i przechowywania wiedzy jest ułomna, gdyż nie zapewnia odpowiedniej naukowej i metrologicznej jakości tych danych. Nawet w danych stałych podstawowych opublikowanych w ostatnich czterech korektach CODATA (Committee on Data for Science and Technology) z lat 1998-2006 [11]-[14] nieustannie występują podobnego rodzaju niepoprawności, tj. ujemne wartości własne macierzy korelacji oraz niewłaściwie obliczone niektóre niepewności standardowe. Ponadto obecna praktyka selekcji i ekstrakcji danych pomiarowych z publikacji jako danych odniesienia do zastosowań naukowych i gospodarczych nie zapobiega rozprzestrzenianiu niepewnych lub nieprawidłowych danych pomiarowych, nawet przekazywanych drogą elektroniczną. Trzeba stworzyć sformalizowane procedury oraz środki "przesiewu i akceptacji" danych zwłaszcza do zastosowań o wysokiej precyzji, wysoce odpowiedzialnych i o dużym ryzyku.

Do pokonania są poniższe zadania.

- Podstawy teoretyczne i specyfika wyrażania wyników pośrednich pomiarów wieloparametrowych nie jest szerzej znana nawet w kręgach metrologicznych, głównie ze względu na nieukazanie się oczekiwanego od dawna Suplementu 2 do GUM.
- Obowiązujące normy i dotychczasowe przewodniki nie zawierają zaleceń wystarczających do zapewnienia dobrej jakości dla raportowanych i publikowanych danych wielowymiarowych.
- Dotychczasowe standardy i praktyka publikowania nadal jest zorientowana głównie na tradycyjne formy prezentacji danych na papierze [1-10]. Uniemożliwia to pełną realizację możliwości wielowymiarowej analizy statystycznej, hamuje rozwój wzorców pomiarowych i odpowiednich metrologicznych przewodników.

Wychodząc naprzeciw dwu pierwszym rodzajom tych potrzeb autorzy przedstawili w zarysie podstawy teoretyczne opisu wyników pomiaru multimezurandu z zastosowaniem algebry wektorów losowych [18]. W kolejnej publikacji [19] zanalizowali krytycznie fragmenty Przewodnika GUM związane z pomiarami multimezurandu, zaproponowali niezbędne zmiany oraz podali zasady i progi dla zaokrąglania standardowego i poniżej tych progów oraz zasady wyboru rzędu szeregu Taylora dla funkcji nieliniowych.

Poniżej, po scharakteryzowaniu specyfiki potrzeb metrologicznych nauki, metrologii, gospodarki i edukacji, omówiono zauważone nieścisłości w obowiązujących danych podstawowych stałych fizycznych opublikowanych w ostatnich korektach CODATA

oraz zaproponowano podjęcie prac nad międzynarodową standaryzacją dualnego sposobu publikowania danych multimezurandu: na papierze i z wykorzystaniem pełnych możliwości *e-publishing*. Byłyby to zasady komplementarne z od dawna oczekiwanym Suplementem 2 do GUM.

2. Potrzeby metrologiczne różnych dziedzin

Scharakteryzujemy dane pomiarowe potrzebne w różnych rodzajach działalności intelektualnej i ich relacje. Prześledzimy je na przykładzie fizyki, metrologii i dziedzin z nimi związanych.

Fizyka, jako jedna z nauk ścisłych zajmuje się poszukiwaniem nowych zjawisk. Współcześnie charakteryzuje się ona przechodzeniem od bezpośrednich rozpoznawczych poszukiwań tych zjawisk do systematycznie prowadzonych i o wysokiej precyzji pomiarów pośrednich wielu mierzonych jednocześnie wielkości i z obszernym udziałem symulacji. Dane pomiarowe stały się już wielowymiarowe. Fizyka tworzy i gromadzi te dane, aby udowodnić istnienie prawidłowości. Natomiast nie dba zbyt o metrologiczną jakość danych, które będą potrzebne w przyszłości w nauce, edukacji i wielu dziedzinach gospodarki. Naukowcy interesują się głównie poszerzaniem granic wiedzy i nie mają czasu i środków, ani nie odczuwają potrzeby szczegółowych badań odkrytych zjawisk pod kątem przyszłego zastosowania. Z drugiej strony, do przeprowadzania nowych poszukiwań potrzebują jednak pilnie niezbędnych danych o jak najlepszej jakości. Metrologia nie jest w stanie na bieżąco dostarczać im aktualnych danych i naukowcy zmuszeni są do tworzenia własnych centrów danych pomiarowych o różnych poziomach jakości.

Metrologia nie może dostarczyć najnowszych danych głównie dlatego, że jakość metrologiczna opublikowanych „danych z odkryć” daleka jest od właściwej. Metrologi z założenia rzadko prowadzą badania na granicy wiedzy, gdyż nie poszukują nowych metod pomiarowych dla zjawisk nieznanych. Głównie dbają o jednolitość pomiarów i jakość danych pomiarowych dla zjawisk znanych, które mają, lub mogą mieć rychłe zastosowanie w praktyce. Metrologia przystosowuje też nowe metody i techniki pomiarowe powstałe w nauce do tworzenia i doskonalenia wzorców miar wykorzystywanych w wielu dziedzinach.

Gospodarka, a szczególnie przemysł i dyscypliny inżynierskie również potrzebują wysokiej jakości aktualnych danych pomiarowych o znanych zjawiskach, szczególnie dla zaawansowanych technologii i zastosowań o dużym ryzyku. Nauka dostarcza małą część tych danych, tj. te, które wystarczają dla odkryć, ale nie dla innych zastosowań. Metrologia i przemysł muszą tworzyć własne laboratoria badawcze i centra danych niezbędnych do projektowania nowych produktów (również służących nauce).

Edukacja, głównie na studiach wyższych, potrzebuje wysokiej jakości danych pomiarowych i danych na ich podstawie szacowanych do kształcenia i szkolenia młodych specjalistów we współczesnych metodach pomiaru i przetwarzania danych dla wszystkich dziedzin, które intensywnie użytkują te dane w praktyce.

Tak więc te wszystkie cztery rodzaje działalności intelektualnej: nauka, edukacja, metrologia i przemysł - o ang. skrócie SEMI, które tworzą dane pomiarowe i z nich korzystają, są ściśle ze sobą powiązane, ale ich rozwój nie jest synchronizowany. Jest to jedna z głównych przyczyn trudności występujących przy ustalaniu i utrzymywaniu "jednolitości pomiarów" i "jednolitej jakości (jednorodności) danych pomiarowych" we wszystkich działaniach intelektualnych. Oba rodzaje ujednolicenia są niezbędne dla spójnego rozwoju dziedzin SEMI, dzięki któremu wzrosła by z kolei wydajność każdej z nich. Podstawowe wielkości i relacje powinny być tak standaryzowane, aby skomponować "alfabet i gramatykę" Natury do spójnego stosowania w dziedzinach SEMI i szerzej w społeczeństwie. Jest to wspólna misja nauki i metrologii.

Wyrażanie danych wielowymiarowych w postaciach liczbowych, ich przechowywanie i przetwarzanie stało się obecnie bardziej skomplikowane. Pomimo, że komputerowa obróbka wielowymiarowych danych pomiarowych rozpoczęła się około pięćdziesiąt lat temu, wciąż nie ma ustalonych wspólnych metod i zasad jak wyrażać i przekazywać estymaty parametrów wielu wielkości mierzonych jednocześnie wraz z ich niepewnościami. Metrologia nie jest w stanie nadążyć za szybkim rozwojem nauki i technologii. Dotąd nie ukazały się zalecenia w postaci Suplementu 2 dla pomiarów n -wymiarowych. Naukowcy i nawet metrologi stosują zalecenia tylko dla pomiarów "jednowymiarowych" ignorując specyfikę pomiarów multimezurandu.

3. Opis wyniku pomiarów wielkości wektorowej

Dowolną mierzoną skalarną wielkość losową (mezurand) wyraża się numerycznie przez minimalną strukturę danych, która zawiera estymator punktu ich skupienia i towarzyszący mu przedział ufności (zakres rozrzutu danych obserwacji pomiarowych o określonym prawdopodobieństwie ich występowania). Zwykle jest to wartość średnia \bar{x} (dla rozkładów niegaussowskich są też inne dokładniejsze od niej estymatory) i jej przedział wyrażany w wartościach odchylenia standardowego σ . Przy jednoczesnym wyznaczaniu wielkości powiązanych statystycznie (ang. *observables*), czyli multimezurandu z pomiarów pośrednich wieloparametrowych, podaje się współrzędne wektora średniego i opis wielowymiarowego obszaru rozrzutu jego końca o zadanym prawdopodobieństwie. Opis jest bardziej złożony niż dla skalarą wskutek skorelowania niepewności składowych wektora i zmiany geometrii obszaru jego rozrzutu, zależnie od funkcji wiążącej mezurand wyjściowy z wielkościami bezpośrednio mierzonymi.

Najprostszym obszarem opisującym rozrzut w n -wymiarach jest hiper-prostokąt o bokach zorientowanych równoległe do osi. Otrzymuje się go bezpośrednio z jednowymiarowych przedziałów rozrzutu składowych. Koniec średniego wektora jest w jego centrum. W ogólnym przypadku mogą wystąpić opisy wartości n składowych wektora średniego różniące się liczbą cyfr po przecinku. Dąży się do ujednolicenia opisu niepewności w postaci przedziału ufności w liczbach dziesiętnych, lub też w %.

Do oszacowania n -wymiarowego obszaru rozrzutu bardziej odpowiednią bryłą jest hiper-elipsoida, gdyż jej kształt jest zachowywany w liniowych propagacjach niepewności danych skorelowanych. Można ją opisać ograniczony i niezdegenerowany obszar rozrzutu danych wektora przez parametry łącznego rozkładu prawdopodobieństwa składowych. Hyper-elipsoidy mają dobrze opracowany opis analityczny w postaci dodatnio określonych form kwadratowych [16]-[19]. Dla n -wymiarowego rozkładu normalnego obszar ufności jest n -wymiarową elipsoidą określoną przez macierz kowariancji o wymiarach $n \times n$. Jeśli rozrzuty obserwacji pomiarowych składowych wektora nie są skorelowane, to osie elipsoidy są równoległe do osi składowych. Właściwa struktura danych multimezurandu zawiera wektor wartości średnich \bar{x} i macierz kowariancji \mathbf{c} lub macierz korelacji \mathbf{r} powiązaną z nią i macierzą diagonalną odchyłeń standartowych $\boldsymbol{\sigma}$ jako $\mathbf{c} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}^T$.

Dla $n=2$ struktura ta jest następująca:

$$\left(\begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 \cdot r_{12} \\ \sigma_1 \sigma_2 \cdot r_{12} & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \right) \Rightarrow \left(\begin{bmatrix} \bar{x}_1 \pm \sigma_1 \\ \bar{x}_2 \pm \sigma_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{bmatrix} \right) \quad (1)$$

Przy prawidłowym posługiwaniu się taką strukturą w przetwarzaniu i wymianie danych nie wystarczy już by korzystać tylko z procedur opracowanych i znormalizowanych dla pomiaru pojedynczej wielkości, np. z GUM. W każdym przekształcaniu danych należy śledzić zmiany granic obszaru rozrzutu i czy koniec wierzchołka wektora średniego leży wewnątrz przekształconego obszaru rozproszenia niezaokrąglonych danych pomiarowych.

Zestaw danych do wyrażania wyniku pomiaru wielkości wektorowej, czyli multimezurandu i do poprawnego jej oszacowania, powinien więc zawierać:

- wektor średni - wartości średnie współrzędnych,
- wektor odchyłeń standardowych tych wartości,
- dodatnio określoną macierz korelacji,
- minimalną wartość własną macierzy korelacji (korelatora),
- precyzję obliczania wartości własnych macierzy korelacji.

Przy takich danych użytkownik uzyska pełną informację niezbędną do planowania badań i kontroli bezpiecznego korzystania z danych w pomiarach i obliczeniach przy ich przetwarzaniu.

Najprostszą i najpowszechniej stosowaną transformacją danych pomiarowych jest zaokrąglenie wyrażań liczbowych opisujących średnie i ich kowariancje (lub korelacje). Dla wielowymiarowych danych pomiarowych operację tę można obecnie dokonywać dowolnie, tj. tak jak zamierza się przedstawić wyniki pomiarów zainteresowanym ich interpretacją i stosowaniem. W metrologii prawnej nie ukazał się jeszcze żaden przewodnik z zaleceniami, jak poprawnie zaokrągląć takie dane. Opis n -elipsoidalny rozrzutu danych pomiarowych występuje, gdy macierz kowariancji c (i korelator r) są dodatnio określone, tj. jej wartości własne λ_i , będące jednokrotnymi pierwiastkami równania charakterystycznego $\det[c-\lambda I]=0$, są dodatnie. Parametry statystyczne próbek o bardzo dużej liczności są bliskie parametrom populacji i koniec ich zaokrąglonego wektora należy utrzymywać wewnątrz obszaru opisującego rozrzut danych niezaokrąglonych [16]-[19]. Również cyfrowe przetwarzanie danych wielkości skorelowanych dla próbek o małej liczności powinno być dokładne, by nie wprowadzać dodatkowych niepewności, a zaokrąglenia należy dokonywać dla wyników końcowych. Niezależne zaokrąglenie składowych wektora i elementów macierzy korelacji może spowodować pojawienie się wyników, które nie spełniają powyższych wymagań.

Jak już wspomniano, w literaturze naukowej jest wiele przykładów wyników pomiarów, ich oszacowań i procedur wymiany danych znacząco odbiegających od tych wymagań, patrz np. uwagi do pozycji [11]-[14] i [16]. Oto przyczyny nieprawidłowości:

- Podaje się tylko średnie wartości składowych wektora wraz z ich odchyleniami standardowymi, a pomija macierz korelacji.
- Często dane elementów korelatora są "za bardzo zaokrąglone", tj. tak, że wyznacznik macierzy nie jest dodatni.
- Końcowy, zbytnio zaokrąglony wektor średni wychodzi poza granice obszaru rozrzutu wyników surowych obserwacji pomiarowych na wiele odchyłeń standardowych. Jest to najbardziej szkodliwa – ukryta dezinformacja, gdyż obszar rozrzutu określa niepewność oszacowania składowych wektora.

Przykłady ilustrujące jak oszacowania oparte na prawidłowych wynikach pomiarów wieloparametrowych można zniekształcić przez zastosowanie procedury zalecanej dla przypadku skalarnego omówiono w poprzednich pracach [6], [16] – [19].

4. Prawa fizyczne a statystyczna analiza danych

Ostatecznym celem badań w fizyce jest ograniczenie liczby pojęć podstawowych i tworzenie matematycznych formuł (modeli) służących wyjaśnianiu lub przewidywaniu wyników pomiarów jak największej liczby wielkości w oparciu o parametry pojęć podstawowych i "prawa fizyki" łączące je z wieloma różnymi wielkościami obserwowanymi (obserwabliami). Specyfikę pośrednich pomiarów wieloparametrowych prześledzimy na przykładzie wyznaczania wartości n pochodnych stałych fizycznych, lub wielkości powiązanych z nimi analitycznie, z danych m podstawowych stałych fizycznych o ang. skrócie FPC. Multimezurand wyjściowy jest tu zbiorem stałych pochodnych. Większość tych stałych ma wymiary wyrażane w jednostkach SI i ich zależność od dwóch lub więcej stałych FPC o różnych wymiarach jest zwykle nieliniowa. Odwzorowanie obszaru rozproszenia obserwacji w przestrzeni FPC w dziedzinę obserwabli będzie wówczas operacją nieliniową. Powierzchnie bryły ograniczającej obszar rozrzutu wyników wielkości wyjściowych o określonym prawdopodobieństwie

w wielowymiarowej euklidesowej przestrzeni obserwabli wyjściowych podlegają zakrzywieniu. Stosując klasyczną liniową formułę propagacji wariancji estymat rozrzutu danych ignoruje się tę zależność i narusza prawa fizyki.

Wniosek: liniowa procedura propagacji jest dopuszczalna tylko wtedy, gdy liczba n obserwabli wyjściowych i m parametrów wejściowych spełnia zależność $n \leq m$, oraz odpowiadająca jej macierz czułości nie jest zdegenerowana. Przy wystarczającej precyzji oszacowania, nie wystąpią wtedy problemy z zapewnieniem dodatniej określoności macierzy i oceną ufności obszaru rozproszenia w przestrzeni obserwabli. We wszystkich innych przypadkach nie należy stosować liniowej procedury propagacji niepewności. W fizyce i metrologii należało by obecnie przejść do powszechnego używania dobrze już rozwiniętych odpowiednich statystyk wielowymiarowych przedstawionych w skrócie w [18], [19] i w wielu najnowszych podręcznikach statystyki matematycznej oraz w Internecie, a dla zależności nieliniowych - do statystyki na bryle obrotowej - patrz [8] i bibliografia tamże.

5. Dokładność danych odniesienia

Centrum Danych o Stałych Podstawowych (NIST Fundamental Constants Data Center, FCDC) w National Institute of Science & Technology (NIST, USA) wraz z postępem wiedzy regularnie koryguje wartości podstawowych stałych fizycznych FPC i publikuje je w sprawozdaniach i czasopiśmie międzynarodowej organizacji CODATA jako jedyne źródło bieżących wartości FPC zalecanych do stosowania w nauce, metrologii i innych dziedzinach. Dotyczy to korekcy wartości liczbowych 325 wielkości, z których 79 to niezależne algebraicznie stałe fizyczne, czyli tzw. stałe podstawowe C_a^B . Do ich oszacowania według równań wiążących je z wielkościami mierzonymi stosuje się metodę najmniejszych kwadratów (LSA). Pozostałe stałe C_i^D , nazywane pochodnymi, szacuje się według zależności funkcyjnych wiążących je ze stałymi podstawowymi: $C_i^D = \Phi_i(C_a^B)$.

Zwykle zależności Φ_i są prostymi funkcjami algebraicznymi, wiele z nich jest nieliniowych i mogą występować współzależności pomiędzy stałymi pochodnymi. W prezentacji C_i^D występuje globalna macierz korelacji o wymiarach 325×325 . Obliczanie elementów tej macierzy według liniowej propagacji niepewności powoduje znaczną jej degenerację i otrzymuje się około $325 - 79 = 246$ równych zeru wartości własnych.

W [16] rozpatrzono numerycznie przykład wyrażenia wektora znanych stałych: ładunku elementarnego, stałej Plancka, masy elektronu i stałej struktury subtelnej - $\{e, h, m_e, \alpha(0)^{-1}\}$ w jednostkach SI, dla ostatnich czterech korekcy wartości tych stałych opublikowanych przez międzynarodową organizację CODATA. Wykryto tu nieprawidłowe ujemne wartości własne w macierzach korelacji - patrz odnośniki do pozycji literatury [11]-[14]. Prawdopodobnie użytą w obliczeniach poprawną macierz zaokrąglono nadmiernie przygotowując ten tekst do opublikowania.

Wartości w jednostkach SI wybranych stałych fizycznych $\{m_e, e, 1/\alpha(0), h\}$ jako danych odniesienia zestawiono w tabeli 1 w chronologii kolejnych korekt od 1987 r. do ostatniej z 2006 r., której dane w jednostkach energii zawiera tabela 2.

Zastrzeżenia szczegółowe wyniki ze sprawdzenia jakości danych FPC-2006 są następujące:

- Na stronie NIST nie podano danych wejściowych dla użytych w korektach 2006 wartości podstawowych stałych fizycznych (FPC). Zawierają je tablice 1 i 2 z publikacji [14].
- W publikacji [14], w danych użytych do oszacowania wartości stałej Rydberga zwiększono dokładność wejściowych współczynników korelacji do czterech cyfr po przecinku. Jednakże cała wejściowa macierz korelacji (z Tabeli XXIX) nie jest dodatnio określona. Ma ona dwie ujemne niepomijalne wartości własne.
- Podana w tabeli L na stronie 715 sub-macierz (cząstkowa) macierzy korelacji korekt FPC-2006 również nie jest dodatnio określona. Dla niektórych stałych fizycznych wybranych ze

strony NIST ich macierze korelacji nie są określone dodatnio, w tym:

- stała Plancka, elementarny ładunek elektryczny, masa elektronu, odwrotność stałej struktury subtelnej;
- masa protonu w MeV, masa neutronu w MeV, stała masy atomowej w MeV.

Niedopuszczalna jest tu liniowa propagacja wariancji niepewności i nadmierne zaokrąglenie.

Tak więc danych FPC-2006 nie można użyć do szacowania wartości wielkości wyrażanych przez więcej niż dwie skorygowane stałe fizyczne do czasu, aż pojawią się dane numeryczne związane z korektą 2006 stałych fizycznych, oszacowane metodą najmniejszych kwadratów o wystarczającej liczbie cyfr znaczących dla obliczeń wartości stałych, pochodnych i innych operacji.

Jest to dodatkowy dowód, że brak norm bezpiecznego numerycznego wyrażania i przekazywania skorelowanych danych oraz brak numerycznego ich recenzowania prowadzi do pojawienia się wewnątrz społeczności naukowej i technicznej ukrytego „binarnego podziału” na twórców, których aktywność zawodowa służy zapewnieniu jak najlepszej ich jakości i na odbiorców tej wiedzy. Dotychczasowa forma publikacji stwarza jednak zjawisko zapory (*firewall phantom*) uniemożliwiającej ocenę prawidłowości danych udostępnianych wszystkim zainteresowanym.

Tab. 1. Wartości i niepewności wybranych stałych fizycznych ($m_e, e, h, 1/\alpha(0)$) według CODATA

Tab. 1. Values and their uncertainty of chosen physical constants ($m_e, e, h, 1/\alpha(0)$) according to CODATA

	Stala fizyczna	Symbol	Miara	Wartość(niepewność)-mnożnik	Współczynniki korelacji
CODATA: 1986 (1987)	Ładunek elementarny	e	C	$1.602\ 177\ 33(49) \cdot 10^{-19}$	e h m_e
	Stala Plancka	h	J s	$6.626\ 075\ 5(40) \cdot 10^{-34}$	0.997
	Masa elektronu	m_e	kg	$9.109\ 389\ 7(54) \cdot 10^{-31}$	0.975 0.989
	1/stała struktury subtelnej	$1/\alpha(0)$		$137.035\ 989\ 5(6)$	-0.226 -0.154 -0.005
CODATA: 1998 (2000)	Ładunek elementarny	e	C	$1.602\ 176\ 462(63) \cdot 10^{-19}$	e h m_e
	Stala Plancka	h	J s	$6.626\ 068\ 76(52) \cdot 10^{-34}$	0.999
	Masa elektronu	m_e	kg	$9.109\ 381\ 88(72) \cdot 10^{-31}$	0.990 0.996
	1/stała struktury subtelnej	$1/\alpha(0)$		$137.035\ 999\ 76(6)$	-0.049 -0.002 0.092
CODATA: 2002 (2005)	Ładunek elementarny	e	C	$1.602\ 176\ 53(14) \cdot 10^{-19}$	e h m_e
	Stala Plancka	h	J s	$6.626\ 0693(11) \cdot 10^{-34}$	1.000
	Masa elektronu	m_e	kg	$9.109\ 3826(16) \cdot 10^{-31}$	0.998 0.999
	1/stała struktury subtelnej	$1/\alpha(0)$		$137.035\ 999\ 11(25)$	-0.029 -0.010 0.029
CODATA: 2006 (2008)	Ładunek elementarny	e	C	$1.602\ 176\ 487(40) \cdot 10^{-19}$	e h m_e
	Stala Plancka	h	J s	$6.626\ 068\ 96(33) \cdot 10^{-34}$	0.9999
	Masa elektronu	m_e	kg	$9.109\ 382\ 15(45) \cdot 10^{-31}$	0.9992 0.9996
	1/stała struktury subtelnej	$1/\alpha(0)$		$137.035\ 999\ 679(94)$	-0.0142 -0.0005 0.0269

Kolorem czerwonym zaznaczono wartości nadmierne zaokrąglone i o niepoprawnej propagacji niepewności.

Wartości własne macierzy korelacji wybranych stałych w jednostkach SI (ujemne pogrubione i w kolorze czerwonym)

- 1986: {2.99891, 1.00084, 0.000420779, -0.000172106}
- 1998: {2.99029, 1.01003, -0.000441572, 0.000123580}
- 2002: {2.99802, 1.00173, 0.000434393, -0.000183906}
- 2006: {2.99942, 1.00006, 0.000719993, -0.000202165}

Tab. 2. Macierz korelacji niepewności stałych $e, h, m_e, 1/\alpha(0)$ w jednostkach "energii"

Tab. 2. Uncertainty correlation matrix of constants $h, m_e, 1/\alpha(0)$ expressed in "energy" units

CODATA 2006(8)	Symbol	Miara	Wartość (niepewność) i mnożnik	Współczynniki korelacji
Ładunek elementarny	e	C	$1.602\ 176\ 487(40) \cdot 10^{-19}$	e h m_e
Stala Plancka	h	eVs	$4.135\ 667\ 33(10) \cdot 10^{-15}$	0.9996
Masa elektronu	m_e	MeV	$0.510\ 998\ 910(13)$	0.9966 0.9985
$1/\alpha(0)$	$\alpha(0)^{-1}$		$137.035\ 989\ 5(61)$	-0.0142 0.0132 0.0679

Wartości własne macierzy korelacji: 2.99721, 1.00275, 0.0000341718, $1.40788 \cdot 10^{-6}$.

6. Propozycje zakresu standaryzacji

Analiza podstawowej literatury [1]-[5] i wielu publikacji z fizyki [16] oraz poradników metrologicznych [9, 10] o przetwarzaniu danych pomiarowych wykazała braki i pilne potrzeby, nawet w samej metrologii [6], [17], [19]. Niewłaściwe procedury wyznaczania wyników pomiarów wieloparametrowych użyte w badaniach naukowych i stosowanych powodują, że dane

są często publikowane nieprawidłowo. W metrologii brakuje jeszcze zaleceń dla numerycznego wyrażania i przekazywania danych multi-mezurandów. Po analizie przykładów t. zw. "złych praktyk" w pracach [6], [16]-[19] starano się sformułować wymagania dla prawidłowej prezentacji i przekazywania takich danych.

Forma komunikacji naukowej jest już teraz w dużym stopniu oparta na e-publikacjach, ale zorientowanych nadal na tradycyjną formę przekazu - na papierze. Nie wystarcza już ona do wymiany danych z doświadczeń wielowymiarowych oraz dla metrologii o najwyższych dokładnościach [6, 17, 19]. Wyjściem z tej sytuacji jest szersze zastosowanie *e-publishing*, tj. nieuniknione przejście na dwuczęściową formę publikacji. Tradycyjnemu tekstowi opowiadawemu, dobrze już sformalizowanemu redakcyjnie, towarzyszyłyby związane z nim pliki komputerowe. Zawierałyby one te same meta-dane do długotrwałego przechowywania i dostępu. Analogiczną opinię opublikowano z kręgów organizacji OECD [15] (cytat w [16]).

Elektroniczne multimedialne środki publikowania, czyli *e-publishing*, otwierają nowe możliwości pozwalające uniknąć ograniczeń techniki publikowania na papierze. W publikacjach o rozszerzonej dualnej formie każdej prezentacji na papierze oszacowanych wyników danych pomiarowych mogłyby towarzyszyć pliki elektroniczne przedstawiające te dane o odpowiedniej rozdzielczości cyfrowej i w pełni czytelne dla komputera. Dzięki temu umożliwi się recenzentom sprawdzanie kompletności i spójności raportowanych danych, ułatwi się ich pobieranie oraz zapobiegnie degradacji przy przekształcaniu z jednej formy w drugą. To proste i logiczne postępowanie zbyt wolno przebiega się do praktyki pomimo intensywnych dyskusji o jakości danych, zarządzaniu i ochronie wiedzy itp.? Przy stosowaniu plików komputerowych występuje też kilka nowych problemów:

- jaka powinna być minimalna struktura danych, aby prawidłowo zapisać wyniki badań?
- jak kontrolować precyzję numeryczną danych liczbowych, aby nie utracić wyników przy transformacji ich formy?

Fizyka i metrologia nie są jeszcze przygotowane do pełnego wykorzystywania ogromnych możliwości *e-publishing* w zachowywaniu poprawnych wyników pomiarów o praktycznie nieograniczonej objętości z *hyper-linkami* i z szybką transmisją. Trzeba sformułować odpowiednie standardy dla plików odczytywanych i zrozumiałych dla komputera, związanych z publikacjami i zawierających prawidłowo przedstawione liczbowo pełne dane pomiarowe.

Wielkim wyzwaniem stojącym przed metrologią i innymi sferami działalności eksperymentalnej jest opracowanie normy do wyrażania i przekazywania wielowymiarowych danych pomiarowych za pomocą e-publikacji i wdrożenie praktyki gruntownych numerycznych weryfikacji tych danych. Istnieje już kilka przykładów standardów roboczych stosowanych w centrach danych, które mogą być podstawą projektu takiej normy. Przykłady można zaczerpnąć i uogólnić np. ze struktur danych w centrach NNDC (National Nuclear Data Center), FCDC, AME, PDG (Particle Data Group).

W pełni i poprawny sposób dane pomiarowe przedstawiono w plikach z rezultatami oszacowania metodą najmniejszych kwadratów 61 jednocześnie wyrażanych wartości podstawowych stałych fizycznych w korekcie FPC-2002 [13]. Pliki FPC są tu podane wraz z publikacją [13] na komputerowej stronie NIST jako LSA-2002. Jest to pierwszy przykład właściwej prezentacji wielowymiarowych danych pomiarowych, który można potraktować jako projekt międzynarodowego standardu. Są to pliki czytelne komputerowo w ASCII i nie wymagają ręcznej interwencji do reedycji strony w liczby. Niestety nie ma takich plików dla korekty wartości stałych z 2006r. [14]. Jeśli pliki o formie LSA-2006 zostałyby powszechnie zaakceptowane, to byłby to kamień milowy na drodze do nowoczesnego standardu dla prezentacji danych wielowymiarowych. Baza danych FPC CODATA w FCDC (NIST) oraz dostosowanie technologii tam opracowanych może stanowić poligon badawczy do opracowywania, doskonalenia i

ewolucji dualnego standardu dla pomiarów wieloparametrowych przed powszechnym jego zastosowaniem.

Opracowanie niezbędnych standardów dla wyznaczania, przedstawiania i publikowania wielowymiarowych danych pomiarowych w mediach elektronicznych jest niecierpiące zwłoki. Metrologi przy tworzeniu przepisów międzynarodowych z założenia działają powoli. Dlatego też V. Ezhela zaproponował rosyjskiemu Komitetowi CODATA przyspieszenie tego procesu poprzez opracowanie roboczego projektu takiego standardu i przekazanie go odpowiednim organizacjom metrologicznym do ekspertyzy i wdrożenia w systemie przepisów metrologicznych.

7. Podsumowanie i wnioski ogólne

W trzeciej z kolejnych publikacji mających przybliżyć metodę przetwarzania danych pomiarów pośrednich wieloparametrowych wskazano nieścisłości w ostatnich kilku korektach danych podstawowych stałych fizycznych opublikowanych przez NIST i CODATA. Zaproponowano też, aby zakresem międzynarodowych prac normalizacyjnych objąć dualny sposób prezentacji i publikowania danych pomiarów wieloparametrowych – na papierze i za pomocą e-publishing. Propozycja ta powstała po analizie wspólnych dla całej społeczności naukowej i technicznej problemów występujących przy numerycznym wyznaczaniu i przedstawianiu skorelowanych wieloparametrowych danych pomiarowych w publikacjach i plikach komputerowych. Trudności występują wskutek braku akceptowanych powszechnie standardów numerycznego wyrażania takich danych pomiarowych i niemożności ich numerycznej weryfikacji przy tradycyjnej formie publikacji „na papierze” oraz elektronicznej o stosowanej obecnie dowolnej formie. Tych trudności uniknie się po ujednoczeniu sposobu wyrażania danych wielowymiarowych i zmianie formy w jednolitą „czytelną i zrozumiałą” dla komputera.

Przewiduje się też, że dzięki temu nastąpiłyby istotne zmiany w sposobie posługiwania się danymi pomiarowymi, ale do rozwiązania jest jeszcze szereg problemów, które w przyszłości mogą uczynić bardziej komfortową i użyteczną pracę z pomiarowymi danymi naukowymi i technicznymi w nauce, metrologii i technice, bankowości oraz w wielu innych dziedzinach.

Stosowane w fizyce dokładne przetwarzanie danych mierzonych wieloparametrowych warte jest zaadoptowania w metrologii o najwyższej dokładności i w wieloparametrowych pomiarach użytkowych, ale po niezbędnych uproszczeniach, w tym dla pomiarów z próbkami o małej liczbie jednoczesnych obserwacji. Dotyczy to w szczególności pomiarów o rozrzutach wyników (opisywanych niepewnością typu A) porównywalnych lub większych od nieusuwalnych przez poprawki resztek błędów systematycznych i instrumentalnych (niepewność typu B). Metoda ta powinna też występować w zaleceniach oczekiwanego od dawną Suplementu 2. Racjonalizowane sposoby opisu niepewności wektorowych danych pomiarowych znajdują zastosowanie w wielu dziedzinach, m.in. w identyfikacji obiektów sterowania, badaniach materiałów i środowiska oraz w diagnostyce technicznej.

8. Uwagi o jakości prezentacji danych pomiarowych zamieszczonych w tekstach [11]-[14]

Niepewności głównego rezultatu w [11] są nieprawidłowe. Niektóre przedstawione macierze korelacji nie są dodatnio półokreślone (zob. [6] i raporty V. E. na Kongresie CODATA) [16].

Niepewności głównego rezultatu i niektóre macierze korelacji w [12] i na stronie FPC CODATA są nieprawidłowe (szczegóły jak wyżej) [16].

Wartości i niepewności niektórych stałych pochodnych oraz macierze korelacji w tekście [13] i na stronie FPC CODATA są nieprawidłowe. Po raz pierwszy dla podstawowych stałych zostało zaprezentowane w pełni czytelne dla komputera wyjście - pliki LSA (szczegóły jak wyżej) [16].

Wartości i niepewności niektórych stałych pochodnych oraz macierze korelacji w [14] i na stronie FPC CODATA są niepoprawne. Sprawozdaniu nie towarzyszą pliki LSA dla podstawowych stałych. Brak na stronie FPC wiadomości od 2007 r. [16].

9. Literatura

- [1] Gavrin D., Golashvili T., Kehiaian H.V., Kurti N., Westrum Jr. E.F.: [CODATA Task Group on Publication of Data in the Primary Literature]: Guide for the Presentation in the Primary Literature of Numerical Data Derived from Experiments, CODATA Bulletin 9, 1973.
- [2] NAP publ.: Sharing publication-related data and materials: responsibilities of authorship in the life sciences. Washington D.C.
- [3] Radziwill N. M.: Foundation for Quality Management of Scientific Data Products. Quality Management Journal, 13(2), 2006, p.7.
- [4] Lide David R.: Data quality - more important than ever in the Internet age. CODATA DSJ 6 (2007, p.154-155).
- [5] Norris Ray P.: How to Make the Dream Come True: The Astronomer's Data Manifesto, CODATA DSJ 6, 2007 p.116-.
- [6] Ezhela V.: A multi-measurand ISO GUM supplement is urgent. CODATA DSJ 6, S676-789 [Errata: CODATA DSJ 7, 2007 E2-21].
- [7] Iwata Shuichi: Scientific "Agenda" Of Data Science. CODATA DSJ 7, 2008 p. 54-56.
- [8] Pennes X.: Intrinsic Statistics on Riemannian Manifolds: Basic Tools for Geometric Measurements, Jour. of Math. Imag.and Vision 25 (2006) 127.
- [9] BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, and OIML: Guide to the expression of uncertainty in measurement. ISO/IEC Guide 98:1995, 2nd edition (Wyrażanie Niepewności Pomiaru Przewodnik). Główny Urząd Miar, Warszawa, Wyd. Alfavero 2002).
- [10] ISO/IEC Guide 98-3:2008, Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995), revised (2008) JCGM-100-2008.
- [11] Cohen E. R. and Taylor B. N.: The 1986 adjustment of the fundamental physical constants. Rev. Mod. Phys. 59, 1986 p.1121 CODATA-1986.
- [12] Mohr P. J. and Taylor B. N.: CODATA recommended values of the fundamental physical constants 1998, Rev. Mod. Phys. 72, 2000 p. 351 CODATA-1998.
- [13] Mohr P. J. and Taylor B. N.; CODATA recommended values of the fundamental physical constants 2002, Rev. Mod. Phys. 77 (2005), 1 CODATA-2002.
- [14] Mohr P. J., Taylor B. N. and Newell D. B., CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006, Rev. Mod. Phys. 80 (2008)p. 633 CODATA-2006.
- [15] Green T.: We Need Publishing Standards for Data sets and Data Tables, OECD Publishing White Paper, OECD 2009. <http://dx.doi.org/10.1787/603233448430>
- [16] Ezhela V.: Physics and Metrology. Materiały V Kongresu Metrologii KM 2010, Politechnika Łódzka, CD.
- [17] Ezhela V.: Comments on some clauses of GUM which provoking the incorrect presentation of measured data in scientific literature Materiały V Kongresu Metrologii KM 2010, Pol. Łódzka, CD.
- [18] Warsza Z., Ezhela V.: Zarys podstaw teoretycznych wyznaczania numerycznej prezentacji wyników pomiarów pośrednich wieloparametrowych. PAK nr 2/2011, s. 175-179.
- [19] Warsza Z., Ezhela V.: Sugestie uściśleń kilku w GUM-2008 i zaokrąglanie wyników pomiarów wieloparametrowych. PAK nr 3/2011, s. 291-296.