

Zygmunt L. WARSZA¹, Andrzej ZIĘBA²¹ PRZEMYSŁOWY INSTYTUT AUTOMATYKI I POMIARÓW PIAP, Al. Jerozolimskie 202, 02-486 Warszawa² AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA, WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ, Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków**Niepewność typu A pomiaru o obserwacjach samoskorelowanych****Doc. (em.) dr inż. Zygmunt Lech WARSZA**

Ukończył Miernictwo Elektryczne w Politechnice Warszawskiej 1959, doktorat 1967, docent od 1970. Pracował w Instytucie Elektrotechniki i P.W., obecnie w PIAP. Zorganizował i prowadził: Wydział Transportu Pol. Świętokrzyskiej, Ośrodek Aparatury Pomiarowej IMGW, Zakład Automatykacji i Techniki Pomiarowej IChP. Wykładał metrologię i diagnostykę techniczną w Pol. Radomskiej do 2002 r. Autor około 130 publikacji, 2 monografii, kilkudziesięciu prac konstrukcyjnych i badawczych, 11 patentów, promotor 2 doktorów.

e-mail: zlw@op.pl

**Prof. dr hab. inż. Andrzej ZIĘBA**

Ukończył Wydział Elektryczny w AGH, pracuje w Wydziale Fizyki i Informatyki Stosowanej tej uczelni. Przez lata zajmował się fizyką magnetyzmu ciała stałego i przemian fazowych, następnie zastosowaniem paskowego detektora krzemowego do przyspieszenia pomiaru w dyfraktometrze rentgenowskim. Od dekady zajmuje się problematyką metrologii i analizy danych. Autor podręcznika „Opracowanie danych w naukach ścisłych i technicznych z uwzględnieniem konwencji GUM oceny niepewności pomiaru”.

e-mail: Andrzej.Zieba@fis.agh.edu.pl

**Streszczenie**

Omówiono ograniczenia zalecanej w Przewodniku GUM metody wyznaczania niepewności pomiarów typu A. Opisano rozszerzenie jej na pomiary o równomiernym próbkowaniu menzurandu z uwzględnieniem wpływu funkcji autokorelacji wartości obserwacji. Przedstawiono poprzedzającą niezbędną identyfikację i usunięcie składowych regularnie zmiennych z surowych danych pomiarowych. Podano wzory dla równoważnej, tzw. efektywnej liczby nieskorelowanych obserwacji n_{eff} , zależnej od funkcji autokorelacji ρ_k próbki. Umożliwia ona poprawne wyznaczenie niepewności pomiarów według dotychczasowej procedury GUM. Omówiono sposób oszacowania estymaty funkcji autokorelacji r_k z danych pomiarowych. Rozważania zilustrowano przykładami liczbowymi.

Słowa kluczowe: teoria pomiaru, menzurand, niepewność, autokorelacja, efektywna liczba obserwacji, efektywna liczba stopni swobody.

Uncertainty of type A of the measurement with auto-correlated observations**Abstract**

Expanding of the application range of the present formalism of GUM to the case of regularly sampled mutually correlated observations is proposed. First, the obvious previous identification and cleaning of the raw sample data from regularly variable components is discussed briefly. The formulae for standard deviation and standard deviation of the mean are expressed with the use of the so-called effective number of observation n_{eff} . This quantity depends of real number of observation n and elements of the autocorrelation function ρ_k . The another parameter named effective degree of freedom ν_{eff} describes the dispersion of both estimators of standard deviation and can be used to calculate the expanded uncertainty. We also show how to adopt this formalism if only an estimate r_k of the ACF derived from a sample is available. A novel method is introduced based on truncation of the r_k function at the point of its first transit through zero (FTZ). This method can be applied to non-negative ACFs which occurs most often in practice. Considerations are illustrated by the numerical example.

Keywords: measurement theory, measurand, uncertainty, autocorrelation, effective number of observations, effective degree of freedom.

1. Wprowadzenie

Rekomendowane przez przewodnik GUM i jego Suplementy [1 – 4] reguły obliczania i wyrażania niepewności pomiarów stosowane są od szeregu już lat przy wszystkich poziomach dokładności pomiarów, we wszystkich laboratoriach pomiarowych i innych placówkach wykonujących pomiary – od handlu do badań technicznych i podstawowych, w tym w Służbie Miar i akredytowanych laboratoriach. Rozpowszechniły się też one w podręcznikach [5 – 7] i poradnikach metrologicznych, np. [8], w laboratoryjnej praktyce pomiarowej, analizie chemicznej, badaniu materiałów i urządzeń podczas ich wytwarzania i eksploatacji, w kontroli procesów przemysłowych oraz w monitoringu środowiska.

Treść przewodnika GUM obejmuje obecnie tylko pomiary o wartościach obserwacji nie powiązanych ze sobą statystycznie (czyli bez autokorelacji) oraz bez wartości odstających. Obliczanie niepewności złożonej dotyczy przypadku, gdy można stosować liniowe lub linearyzowane prawo propagacji wariancji. Stosowanie dotychczasowej wersji Przewodnika GUM natrafia na ograniczenia w wielu rodzajach pomiarów. W szczególności nie ma np. zaleceń jak jednolicie wyznaczać niepewność w pomiarach procesów zmiennych w czasie lub przestrzeni i dla pomiarów dynamicznych. Brakuje też wskazówek jak, poza metodą Monte Carlo opisaną w Suplemencie 1 [2], używać w pomiarach innych zaawansowanych narzędzi współczesnej statystyki matematycznej.

Propozycje udoskonalenia i rozszerzenia zakresu stosowania tych zaleceń prezentowane są w licznych publikacjach i na wielu seminariach, również i w Polsce. Opracowywaniem nowych przepisów metrologicznych zajmuje się powołany w 1997 r. wspólny komitet 7-miu organizacji międzynarodowych, o skrócie JCGM, pod przewodnictwem dyrektora Międzynarodowego Biura Miar i Wag BIPM. Jest to proces długotrwały, wymaga poprzedzającej weryfikacji w praktyce pomiarowej i nie nadąza za bieżącymi potrzebami szybko rozwijającej się techniki pomiarowej.

Europejskie i światowe środowisko metrologiczne, obok propozycji doskonalenia dotychczasowych zaleceń opracowuje podstawy teoretyczne (w tym w ramach EUROMET-u) dla nowych metod oceny niepewności, nie objętych jeszcze przez konwencję GUM. Badania w tym kierunku rozwijają też niezależnie metrologi z Polski, Ukrainy i Rosji. Pierwszy z autorów (Z.W.) zainicjował nieformalną wymianę poglądów i koordynację niektórych z tych działań, realizowaną głównie drogą internetową. Wybrane rezultaty tych prac przekazane będą poniżej i w innych publikacjach, aby można było je stosować w praktyce pomiarowej. Przyczyniło by się to do eksperymentalnej weryfikacji tych propozycji, koniecznej, aby poprzedzać starania o uwzględnienie ich w unijnych i międzynarodowych przepisach metrologicznych.

Niniejsza publikacja dotyczy problematyki wyznaczania niepewności w pomiarach uzyskanych przez regularne próbkowanie menzurandu. Obejmuje ona usuwanie składowych regularnie zmiennych z surowych danych (nazwane tu ich „czyszczeniem”) i szacowanie niepewności typu A dla próbki o danych samoskorelowanych wraz z estymacją funkcji autokorelacji z jej danych.

2. „Czyszczenie” surowych danych

Niepewność wyniku pomiarów zależy od właściwości całego toru przebiegu sygnału, tj. od wielkości mierzonej na jego wejściu i jej zmian w obiekcie badanym, aż do wyniku pomiarów na wyjściu. Do jej wyznaczenia zwykle wyodrębnia się i lokalizuje miejsca występowania i wartości niepożądanych oddziaływań z otoczenia i zakłóceń oraz zmian parametrów wewnętrznych. We współczesnej technice pomiarowej dominują zelektronizowane systemy i przyrządy cyfrowe, w tym realizowane wirtualnie. Proces zbierania obserwacji pomiarowych jest w dużym stopniu

zautomatyzowany. Wartości sygnału lub odczytów na wyjściu mają postać dyskretną jako rezultat od odpowiednio dobranej częstotliwości regularnego próbkowania wejściowego sygnału analogowego. Rozrzut „surowych” wartości obserwacji w trakcie prowadzenia pomiarów wywołany jest przez przyczyny zarówno losowe, jak i zdeterminowane, jako skutek zmian wewnętrznych parametrów toru pomiarowego i warunków pomiaru. Mogą one różnić się dla każdej z próbek danych pobranych w różnym czasie i dla różnych przyrządów użytych w pomiarach, a nawet dla tego samego przyrządu w ciągu okresu jego użytkowania. Składowa wywołana tą samą przyczyną, np. zmianami temperatury otoczenia, zależnie od długości czasu zbierania próbki pomiarowej, przejawia się bądź jako losowa, bądź jako zdeterminowana o zmianach znanych na bieżąco, lub o nieznannej wartości. Są one też inne w pomiarach laboratoryjnych i przemysłowych. Wpływy niepożądanych oddziaływań należy więc indywidualnie identyfikować w danym eksperymencie.

Zmiany losowe wartości obserwacji bywają stacjonarne i niestacjonarne, w tym w postaci krótkotrwałych zakłóceń (wartości odstające, ang. *outliers*). Przed wyznaczeniem wartości i niepewności wyniku pomiarów powinno się je wykryć i wyeliminować z danych surowych. Algorytm usuwania takich zakłóceń opisano w [9] i nie będzie tu omawiany.

Zmiany regularne występują jako składowa aperiodyczna, czyli trend i jako składowe okresowe. Wpływają one na kształt histogramu próbki oraz na wartość średnią i na składową niepewności typu A. Są więc niepożądane przy wyznaczaniu niepewności.

Błąd o wartości stałej nie można wyznaczyć i usunąć przetwarzając tylko same surowe dane pomiarowe, gdyż do oszacowania poprawek powinna być znana wartość rzeczywista lub poprawna. Jedynym sposobem jest dodatkowa kalibracja.

Jeśli nie zostanie rozpoznany trend, nawet liniowy i nie skoryguje się jego wpływu, to wynik pomiaru, np. jako wartość średnia z obserwacji, będzie obciążony przesunięciem (błędem systematycznym) o nieznaną wartość. W nowszej aparaturze elektronicznej dla usuwania na bieżąco dryftu stosuje się odpowiednio częstą automatyczną adjustację wewnętrzną, w tym zerowanie sygnału na wejściu. Sposób ten nie obejmuje jednak trendu, który powstaje przed wejściem układu pomiarowego, tj. dla wartości samego menzurandu oraz na drodze sygnału przez obiekt badany i tor doprowadzający. Wówczas używa się a posteriori metod obliczeniowych dla danych wyjściowych.

Składowe okresowe w danych pomiarowych pozyskanych w próbkowaniu równomiernym nie wpływają na ich wartość średnią tylko wtedy, gdy próbka obejmuje pełną liczbę okresów oraz gdy okresy te są wielokrotnością odstępu próbkowania ΔT . Warunki te na ogół nie są spełnione i niewyeliminowane składowe okresowe mogą wpływać na wartość średnią wyniku pomiarów oraz zawsze powiększają statystyczną składową (typu A) jego niepewności. Dla większości pomiarów procesów zmiennych w czasie lub przestrzeni trzeba więc stosować odpowiednie procedury filtracji w analogowym i cyfrowym przetwarzaniu sygnału. Jeśli w systemie pomiarowym nie występują automatyczne procedury, to składowe regularne powinno się usuwać obliczeniowo z danych wyjściowych, a jeśli to niemożliwe, to ich wpływy powinno się szacować tak, jak innych składowych niepewności u_B .

Zadanie pomiarowe może polegać nie tylko na mierzeniu wartości stałej, ale też i innych składowych regularnych w danych próbki wraz z oceną ich niepewności. Proces identyfikacji i usuwania niepożądanych składowych z surowych danych pomiarowych zaproponowano nazywać „czyszczeniem danych” [10] - [11]. Ilustruje go podany poniżej przykład liczbowy 1.

Przykład 1

Próbka zawiera serię $n = 121$ „surowych” wyników obserwacji pomiarowych otrzymanych kolejno przy regularnym próbkowaniu badanego procesu i przedstawionych (czarne kwadraty) na rys. 1a. Dane te pochodzą z [11]. Wpływy czynników oddziałujących na obiekt i tor pomiarowy nie są znane. Należy wyznaczyć wynik

pomiaru jako średnią wartość tej serii obserwacji oraz statystyczną (typu A) ocenę jej niepewności.

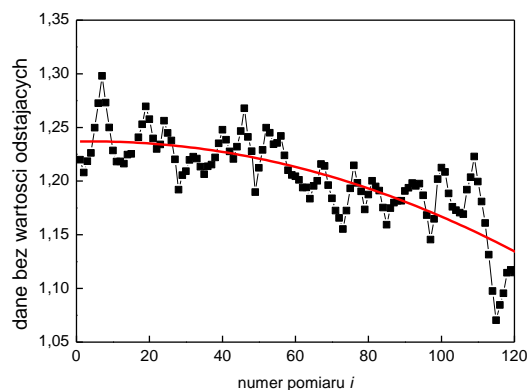
Rozwiązanie

Po usunięciu jednego punktu odstającego [11] wykres pozostałych punktów przedstawia rys. 1a. Analiza jakościowa wykresu pokazuje, że badana próbka:

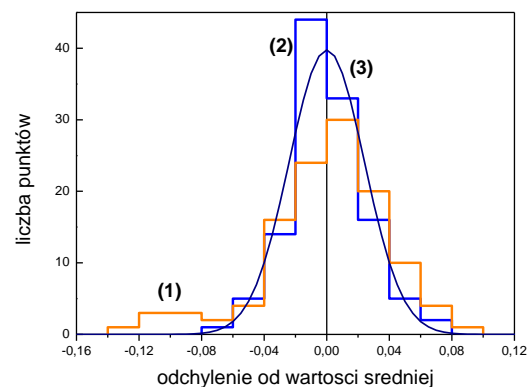
- (i) zawiera nieliniowy trend (malejący),
- (ii) nie ma widocznych składowych okresowych, oraz
- (iii) względnie małe poszarpanie wykresu wskazuje, że dane są samoskorelowane.

Ten ostatni wniosek jakościowy będzie potwierdzony w rozdziale 3.2 przez obliczenie funkcji autokorelacji.

a)



b)



Rys. 1. Przykład danych pomiarowych zebranych kolejno przy równomiernym próbkowaniu: a) odchylenia surowych danych od wartości stałej i wyodrębnione metodą najmniejszych kwadratów (składowa systematyczna - trend); b) rozkłady: surowych danych (1), po odjęciu trendu (2) oraz krzywa Gaussa dopasowana do tych danych (3)

Fig. 1. Set of measurement data collected by regular sampling: a) deviations from the mean value of the raw data and identified its systematic regularly variable component - drift, b) distributions: of raw data (1), after removing systematic component (2) - data cleaning and Gauss function (3) fitted to them

Dane surowe dla tego przykładu mają tendencję zmniejszania się wraz ze wzrostem kolejnego numeru i obserwacji w próbce. Metodą najmniejszych kwadratów (MNK) wyznaczono równanie trendu modelowanego wielomianem drugiego stopnia:

$$y(i) = (-7,65 \cdot 10^{-7})i^2 + (6,6 \cdot 10^{-5})i + 0,034$$

Założono arbitralnie, że przechodzi on przez zero dla wartości średniej próbki, gdyż zmian tej wartości nie można wykryć bez kalibracji zewnętrznej z użyciem dokładniejszego przyrządu lub

wzorca. Po odjęciu od surowych danych zmian trendu otrzymuje się wartości skorygowane $\Delta q'_i$ o mniejszym zakresie zmian.

Ocenę zgodności danych z rozkładem normalnym przy użyciu klasycznego testu chi-kwadrat przedstawiono w pracy [11].

Współcześnie istnieje dostęp do różnych testów zgodności zaimplementowanych w programach komputerowych, np. Kołmogorowa, Lilieforsa czy Shapiro-Wilka. Ten ostatni jest uważany za jeden z najlepszych. Użycie testu Shapiro-Wilka wykaże, że dane przed odjęciem trendu są niezgodne z rozkładem normalnym, a po usunięciu trendu - stają się z nim zgodne. Do tej samej konkluzji można dojść przez subiektywną analizę histogramów rozkładu – na rys. 1b widać, że obecność trendu w danych pierwotnych powoduje wystąpienie asymetrii i silnego „ogona” z lewej strony rozkładu - krzywa (1).

3. Niepewność typu A pomiaru powtarzanego o obserwacjach samoskorelowanych

Z podstawowych wzorów stosowanych do wyznaczenia niepewności typu A wynika, że proporcjonalne zmniejszenie jej wartości, wymaga kwadratowego wzrostu liczby obserwacji pomiarowych n . Współczesna technika umożliwia wykonywanie pomiarów cyfrowych powtarzanych z niemal dowolną częstością w dziedzinie czasu, lub innej wielkości. Aby zwiększyć liczbę obserwacji n w ograniczonym czasie badań, lub skrócić ten czas, często ustawia się odpowiednio gęste próbkowanie. Ograniczenie czasu prowadzenia obserwacji może również wynikać z wymagań dotyczących śledzenia prędkości zmian badanego procesu. Przy zbyt gęstym próbkowaniu rezultaty obserwacji mogą stać się samoskorelowane, czyli powiązane ze sobą statystycznie, szczególnie, gdy w sygnale występują zjawiska losowe intensywne przy małych częstotliwościach, np. szum $1/f$. W takich przypadkach należy znać funkcję autokorelacji opisującą takie powiązanie obserwacji lub wyznaczyć jej estymatę z danych pomiarowych i uwzględnić jej wpływ w oszacowaniu niepewności typu A. Rutynowe stosowanie wzoru dla u_A według GUM da zbyt korzystną, tj. zaniżoną wartość tej składowej niepewności (w niektórych przypadkach nawet dość znacznie). W Przewodniku GUM [1–4] oraz w innych krajowych i europejskich instrukcjach metrologicznych, monografiach i podręcznikach, w tym w [5–8] i w większości publikacji o wyznaczaniu niedokładności pomiarów, np. [M3], zakłada się, że wartości zbioru obserwacji tworzących próbkę pomiarową są od siebie statystycznie niezależne.

Od lat, na wielu krajowych seminariach metrologicznych pierwszy z autorów sygnalizował, że z teorii sygnałów wynika, iż otrzymywane przy próbkowaniu procesu wartości obserwacji pomiarowych można traktować jako niezależne dopiero wtedy, gdy odległość pomiędzy nimi jest większa niż zastępczy promień funkcji autokorelacji oraz, że informację o statystycznym ich powiązaniu można pozyskać z analizy wartości kolejno otrzymywanych obserwacji. Pozostawało to bez odzewu aż do października 2006 r., gdy na polsko – ukraińskim sympozjum MSM w Rzeszowie M. Dorozhovetz przedstawił prosty sposób ujęcia wpływu autokorelacji przez zastępczą liczbę niezależnych obserwacji n_{eff} . Jego wspólne publikacje z Z. Warszą [14], [15] i kilka następnych zainicjowały w środowisku polskich metrologów tematykę wyznaczania niepewności pomiarów z uwzględnieniem wpływu autokorelacji. Równoległe ukazała się też na ten temat praca N. F. Zhanga [13] z *National Institute of Standards and Technology* NIST – głównej amerykańskiej placówki metrologicznej, a później – T. J. Witta z BIPM [16]. Przy wyznaczaniu niepewności nie stosowali oni jednak pojęcia zastępczej, tzw. efektywnej liczby obserwacji n_{eff} . Zagadnienia te rozwinął następnie A. Zięba [17–20]. W pracach tych zostały uściślone wzory dla niepewności standardowej i rozszerzonej oraz zanalizowano dokładność metod wyznaczania estymaty funkcji autokorelacji z danych pomiarowych. Zięba zaproponował też polski termin: „samoskorelowanie obserwacji” i dotarł do najstarszych, zapomnianych już prac Bartelsa z 1935 r. oraz Bayley’a i Hammersley’a z 1946 r. [21],

w których do opisu autoskorelowanych danych meteorologicznych po raz pierwszy wprowadzono n_{eff} . Wpływ nieznajomości funkcji autokorelacji na ocenę niepewności wartości średniej analizował też następnie M. Dorozhovetz [22].

Krótką syntezę obecnego stanu zagadnienia podano poniżej.

3.1. Niepewność standardowa średniej

Jeśli składowe deterministyczne w danych obserwacji tworzących próbkę pomiarową są pomijalne, bądź wyeliminowano je różnymi metodami: przez poprawki, filtrację i czyszczenie danych wyjściowych, to w odpowiednio krótkim okresie zbierania tych danych, można z wystarczającym przybliżeniem opisać je stacjonarnym szeregiem czasowym uzyskanym z próbkowania badanego procesu. Korelacje statystyczne między realizacjami X_i takiego procesu charakteryzuje **funkcja autokorelacji**

$$\rho_k = \frac{\text{cov}(X_i, X_{i+k})}{\sigma^2}. \quad (1)$$

Funkcja ρ_k zależy od widma częstotliwościowego badanego procesu i jest bądź znana, bądź należy znaleźć jej estymatę r_k z danych pomiarowych (patrz rozdział 4.2).

Początkiem wyprowadzenia formalizmu umożliwiającego obliczenie niepewności pomiaru typu A dla takich danych jest związek między odchyleniem standardowym średniej i pojedynczej obserwacji,

$$\frac{\sigma(\bar{x})}{\sigma} = \sqrt{\frac{1 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (1-k/n) \rho_k}{n}}. \quad (2)$$

Wzór ten wynika z twierdzenia o wariancji sumy zmiennych losowych (ponieważ średnia jest sumą podzieloną przez n). Jednym ze sposobów alternatywnego zapisu wzoru (2) jest wprowadzenie wielkości [14]

$$D_\rho \equiv \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \rho_k. \quad (3)$$

Dla **obserwacji statystycznie niezależnych** $\rho_k \rightarrow 0$ (dla $k \geq 1$). W konsekwencji $D_\rho = 0$ i wzór (2) przechodzi w znane wyrażenie $\sigma(\bar{x})/\sigma = 1/\sqrt{n}$.

Gdy obserwacje są **całkowicie skorelowane** (ściśle uzależnione), tj. $\rho_k \rightarrow 1$, z (3) wynika

$$D_\rho \rightarrow \frac{2}{n} \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \cdot 1 = n-1. \quad (4)$$

Wówczas odchylenie standardowe średniej jest takie samo, jak pojedynczej obserwacji. Jest tak, gdyż w granicy $\rho_k \rightarrow 1$, a więc wszystkie kolejne obserwacje będą jednakowe.

Inny sposób przedstawienia wzoru (2) polega na wprowadzeniu pojęcia efektywnej liczby obserwacji. Wzór można zapisać w takiej samej postaci jak w dla obserwacji niezależnych

$$\frac{\sigma(\bar{x})}{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{n_{eff}}}, \quad (5)$$

z wartością

$$n_{eff} = \frac{n}{1 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} (1-k/n) \rho_k} = \frac{n}{1 + D_\rho}. \quad (6)$$

Pozostaje odpowiedzieć na pytanie, jak dla zmiennych samoskorelowanych obliczać odchylenie standardowe indywidualnej obserwacji i średniej. Nieobciążony estymator wariancji wyznacza się powszechnie jako

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad (7)$$

choć dla danych samoskorelowanych staje się on obciążony. W [17] podano wyprowadzenie nieobciążonych estymatorów wariancji pojedynczego pomiaru $s_a^2(q_i)$ i średniej $s_a^2(\bar{x})$. Poniżej, odchylenie standardowe $s_a(q_i)$ zapisano jako iloczyn estymatora $s_a(q_i)$ (obliczany z (7) przez każdy program analizy danych) i mnożnika, zależnego od efektywnej liczby obserwacji, tj.

$$s_a(x_i) = k_a s(x_i), \quad (8)$$

gdzie:

$$k_a = \sqrt{\frac{n_{eff}(n-1)}{n(n_{eff}-1)}}. \quad (8b)$$

Wartość współczynnika k_a jest bliska jedności, dlatego zapewne podany już w r. 1946 [21] wzór (8) zapomniano na ponad pół wieku, zaś odchylenie standardowe s obliczano z wariancji (7).

Obliczenie n_{eff} jest potrzebne do prawidłowego estymowania odchylenia standardowego średniej $s_a(\bar{x})$. Z (8) i (5) wynika

$$s_a(\bar{x}) = \frac{s_a(x_i)}{n_{eff}} = \sqrt{\frac{1}{n(n_{eff}-1)} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (9)$$

lub

$$s_a(\bar{x}) = k_b s(\bar{x}) \quad (9a)$$

gdzie:

$$k_b = \sqrt{\frac{n-1}{n_{eff}-1}} = \sqrt{\frac{1+D_\rho}{1-\frac{1}{n-1}D_\rho}}$$

W granicy dla obserwacji statystycznie niezależnych $n_{eff} \rightarrow n$ i wzór (9) przechodzi w postać klasyczną. Zatem można go przyjąć jako właściwą ocenę niepewności pomiaru przy obserwacjach samoskorelowanych

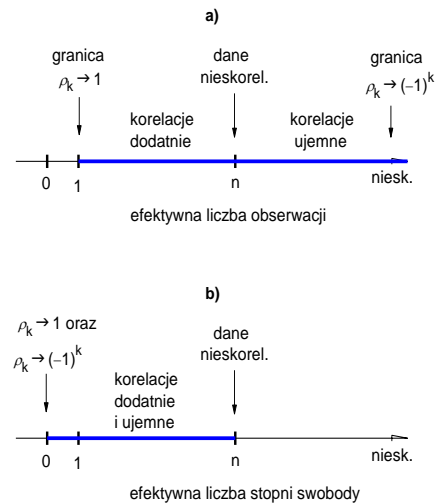
$$u(x) \equiv s_a(\bar{x}), \quad (10)$$

przynajmniej przy założeniu, że rozkład prawdopodobieństwa obserwacji jest zbliżony do rozkładu normalnego.

Dokładność statystycznej oceny niepewności danych nieskorelowanych nie jest zbyt duża i zależy od parametru zwanego liczbą stopni swobody $\nu = n - 1$. Dla danych z autokorelacją można wprowadzić podobny parametr nazwany *efektywną liczbą stopni swobody* [17] i określony w przybliżeniu jako

$$\nu_{eff} \equiv \frac{n}{1 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} \rho_k^2} - 1. \quad (11)$$

Porównanie wyrażen (6) i (11) pokazuje, że $\nu_{eff} \neq n_{eff} - 1$. Zakresy zmian obu liczb efektywnych n_{eff} i ν_{eff} przedstawiono na rys. 2a, b. Z porównania wynika, że pierwsza z nich zmienia się od 1 dla pełnego skorelowania ($\rho_k \rightarrow 1$), a druga ν_{eff} - od zera, do n dla danych nieskorelowanych ($\rho_k=0$). W pomiarach fizycznych korelacja jest zwykle dodatnia.



Rys. 2. Syntetyczne przedstawienie właściwości: a) efektywnej liczby obserwacji n_{eff} oraz b) efektywnej liczby stopni swobody ν_{eff}

Fig. 2. Comprehensive presentation of the properties of effective number of observations n_{eff} and effective degree of freedom ν_{eff}

Wprowadzenie ν_{eff} umożliwia za pomocą obydwu estymatorów zapisanie względnej dyspersji odchylenia standardowego:

$$\frac{u(s_a)}{s_a} = \frac{u(s_a(\bar{x}))}{s_a(\bar{x})} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\nu_{eff}}}. \quad (12)$$

Jest to wzór analogiczny jak dla zmiennej nieskorelowanej ([1] - dodatek E.4.3). Innym zastosowaniem ν_{eff} jest określenie współczynnika rozszerzenia i niepewności rozszerzonej [20].

Reasumując, zaletą formalizmu opartego na efektywnych liczbach n_{eff} oraz ν_{eff} jest maksymalne zbliżenie formalizmu do zwykłych wzorów GUM dla obserwacji statystycznie niezależnych

Przy znanej funkcji autokorelacji łatwo jest też określić maksymalną częstość równomiernego próbkowania, przy której obserwacje można traktować już jako nieskorelowane. Minimalny odstęp ΔT między obserwacjami powinien być większy od połowy zastępczej szerokości funkcji autokorelacji ρ_k (szerokości prostokąta o wysokości 1 i o polu pod tą krzywą). Dla krótszych odstępów ΔT należy stosować wzory (4) – (8).

Z warunku Nyquista wynika, że do wyznaczenia przebiegu sygnału czasowo nieograniczonego i o paśmie częstotliwościowym $0 - B$ potrzeba minimum dwa pomiary dla każdego okresu przebiegu harmonicznego o najwyższej pożądanej częstotliwości. Stąd przy równomiernym próbkowaniu otrzymuje się zależność pomiędzy liczbą obserwacji w próbce, górną częstotliwością B sygnału i czasem zbierania obserwacji T

$$n = 2 B T \quad (13)$$

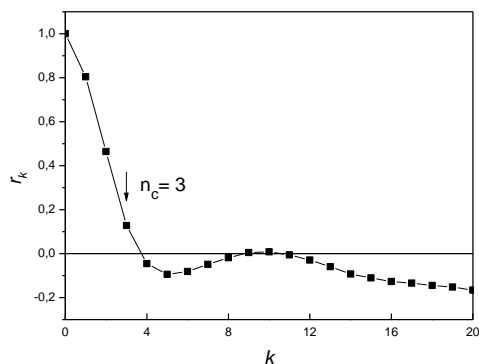
3.2. Estymator funkcji autokorelacji z danych pomiarowych

W eksperymencie funkcja autokorelacji najczęściej nie jest znana i trzeba ją estymować z danych pomiarowych. Estymaty funkcji ρ_k mogą mieć różne postacie analityczne, niemniej najczęściej stosowana i implementowana w programach jest funkcja zdefiniowana jako

$$r_k = \frac{\sum_{i=1}^{n-k} (x_i - \bar{x})(x_{i+k} - \bar{x})}{s^2(q_i)}. \quad (14)$$

Wykres estymaty r_k (rys. 3) ma (dla typowego przypadku przezwagi korelacji dodatnich) dwie, różne jakościowo części. Dla małych wartości odstepu k występuje opadające *zbocze*, w którym jest zawarta realna informacja o autokorelacji.

Pozostała część wykresu w postaci fluktuującego *ogona* stanowi obraz skorelowanego szumu, stwarzającego wrażenie funkcji quasi-ciągłej. Fluktuacje te mogą mieć dość dużą amplitudę gdyż ich odchylenie standardowe jest większe niż $n^{-1/2}$ [18], [M4].



Rys. 3. Początkowa część estymaty funkcji autokorelacji $\{r_k\}$ obliczona z danych rys. 1 (po odjęciu trendu)

Fig. 3. The initial part of the autocorrelation function estimate calculated from the data of Fig. 1a (after removing the trend)

Przy znanej jedynie estymacie r_k funkcji autokorelacji ρ_k , pojawia się zagadnienie, jak na jej podstawie wyznaczyć efektywną liczbę obserwacji? Wartość n_{eff} obliczona na podstawie funkcji ρ_k jest parametrem ustalonym. Natomiast przy stosowaniu estymatora tej funkcji r_k otrzymuje się estymator efektywnej liczby obserwacji \hat{n}_{eff} jako zmienną losową o pewnym rozkładzie gęstości prawdopodobieństwa, wartości oczekiwanej i wariancji.

Proste zastąpienie funkcji ρ_k przez jej estymatę r_k we wzorze (6) daje estymator efektywnej liczby obserwacji o niekorzystnych własnościach. Jego wartość średnia jest mniejsza od n_{eff} i oszacowanie niepewności według (9) będzie zbyt korzystne, tj. zanizone. Przyczyną jest wpływ ogona funkcji autokorelacji. Sumowanie w (6) można ograniczyć arbitralnie tylko do kilku początkowych elementów estymaty r_k [15]. Aby procedurę tą uczynić jednoznaczoną, w [18] zaproponowano następującą modyfikację zależności (6):

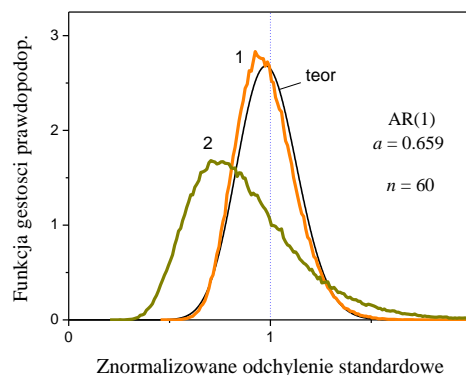
$$\hat{n}_{eff} = \frac{n}{1 + 2 \sum_{k=1}^{n_c} \left(1 - \frac{k}{n}\right) r_k} \quad (15)$$

Graniczny odstep n_c jest określony przez ostatni niezerowy element estymaty r_k przed jej pierwszym przejściem przez zero (metoda FTZ – od ang. *first transit through zero*). Przykładowo, dla krzywej z rys. 3 wartość $n_c = 3$. Z symulacyjnych badań MC wynika, że powoduje to zmniejszenie ujemnego obciążenia estymatora \hat{n}_{eff} . Metodę FTZ można stosować przy założeniu nieujemnej funkcji autokorelacji, ale właśnie ten przypadek korelacji dodatnich występuje zwykle w praktyce.

Uzyskaną wartość \hat{n}_{eff} można użyć do obliczenia $s_a(x_i)$ i $s_a(\bar{x})$ przy wykorzystaniu wzorów (8) i (9). Rysunek 4 zaczerpnięty z [18] pokazuje uzyskane metodą MC przykładowe rozkłady prawdopodobieństwa obydwu estymatorów. Przebieg oznaczony jako *teor* na rys. 4 obliczono ze wzoru dla obserwacji nieskorelowanych o odchyleniu standardowym $z = s/\sigma$, wynikającego z rozkładu χ^2

$$g(z) = \frac{2^{1-\nu/2} \nu^{\nu/2}}{\Gamma(\nu/2)} z^{\nu-1} \exp(-\nu z^2/2), \quad (16)$$

w którym za liczbę stopni swobody ν podstawiono efektywną liczbę stopni swobody ν_{eff} . Wynik ten potwierdza, że suma kwadratów różnic w (7) podlega rozkładowi χ^2 z $\nu \equiv \nu_{eff}$. Niewielka niezgodność wynika z wpływu czynnika k_b , który jest teraz liczbą losową, ale bliską 1. Losowy charakter czynnika jest przyczyną poszerzenia rozkładu dla odchylenia standardowego średniej.



Rys. 4. Funkcje gęstości prawdopodobieństwa dla estymatorów znormalizowanego odchylenia standardowego według modelu AR(1) i wielkości próby losowej $n = 60$ [18]. Krzywe 1 i 2 pochodzą z symulacji MC i dotyczą odpowiednio s_a/σ i $s_a(\bar{x})/\sigma(\bar{x})$. Zależność teoretyczną (teor) obliczono z wykorzystaniem wzoru (16) dla $\nu_{eff} = 22,7$

Fig. 4. PDF of normalized estimators of the standard deviation of autoregressive first order model AR(1) and of random data sample of $n = 60$ [18]. Curves 1 and 2 of s_a/σ , $s_a(\bar{x})/\sigma(\bar{x})$ are from MC simulation.

Theoretical curve (teor) has been calculated using eq. (16) with $\nu_{eff} = 22,7$

Przykład 2

W przykładzie przedstawione zostanie obliczenie odchylenia standardowego pojedynczego pomiaru i średniej dla oczyszczonych danych z przykładu 1, tj. po odjęciu linii trendu. Estymatę funkcji autokorelacji przedstawia rys. 3. Duża wartość wyrazu $\rho_1 = 0,81$ potwierdza jakościowy wniosek o występowaniu samokorelacji obserwacji.

Odchylenie standardowe bez uwzględnienia korelacji (7) wynosi

$$s(q_i) = 0,0397.$$

Z rys. 3 odczytuje się $n_c = 3$ i oblicza estymatę

$$n_{eff} = \frac{120}{1 + 2(0,7804 + 0,464 + 0,127)} = 32,1$$

Wartość współczynnika k_a wynosi 1,012 co potwierdza, że uwzględnienie korelacji ma pomijalnie mały wpływ na wartość

$$s_a(q_i) = 0,0397 \times 1,012 = 0,402$$

(z dokładnością do dwu miejsc znaczących obydwie wartości są identyczne). Odchylenie standardowe średniej wynosi

$$s_a(\bar{q}) = \frac{0,402}{\sqrt{32,1}} = 0,0071.$$

¹ Model AR(1) - autoregresyjny szereg czasowy pierwszego rzędu, dla którego $r_k = a^k$ [17], [19], [M4]

Uwzględnienie wpływu korelacji jest tu istotne, gdyż bez tego uzyskano by wynik zaniżony o czynnik $\sqrt{120/31,1} = 1,96$ czyli prawie dwa razy.

4. Podsumowanie i wnioski

Zagadnienia tu omówione wynikły z potrzeb wyznaczania w praktyce niepewności pomiarów dla danych otrzymywanych przy próbkowaniu. W pracy przedstawiono rezultaty przeprowadzonych badań nad czyszczeniem takich danych ze składowych systematycznych oraz nad formalizmem rozszerzającym metodę obliczania niepewności standardowej typu A według GUM na przypadek danych samoskorelowanych. Formalizm ten opiera się na podstawach teoretycznych, w większości mało znanych wśród metrologów i uzupełniony został przez nowe koncepcje. Całość przetestowano przy użyciu modelowania Monte Carlo. Opracowany sposób jest łatwy do stosowania i można go wykorzystywać w praktyce pomiarowej oraz może stanowić podstawę przepisów rozszerzających GUM. Wnioski z pracy podano poniżej.

- Przy ograniczonym czasie zbierania obserwacji pomiarowych, stosowany w praktyce sposób zmniejszenia niedokładności pomiarów przez zwiększanie liczebności próbki przez wzrost częstości próbkowania jest zawodny, gdyż prowadzi do konieczności uwzględnienia wpływu funkcji autokorelacji obserwacji.
- Dla uniknięcia nieprawidłowości przy wyznaczeniu niepewności $u_A(x)$ należy najpierw odpowiednimi metodami obliczeniowymi zidentyfikować i usunąć z surowych wyników obserwacji składowe systematyczne aperiodyczne i okresowe.
- Dla tak oczyszczonych wartości obserwacji należy znać lub oszacować funkcję autokorelacji. Funkcja ta powoduje istotne zwiększenie niepewności u_A w stosunku do obliczonej według GUM. Odpowiada ona mniejszej, tzw. efektywnej liczbie niezależnych pomiarów, którą należy uwzględnić w szacowaniu niepewności standardowej. Odpowiednio skorygowane wzory do wyznaczania niepewności typu A przy występowaniu autokorelacji danych próbki podano w treści wraz z wynikami obliczeń.
- Istniejące programy komputerowe do obliczania niepewności typu A i niepewności rozszerzonej U należy uzupełnić poprzedzającymi algorytmami do identyfikacji i eliminacji z „surowych” danych składowych aperiodycznych i periodycznych oraz algorytmami do wyznaczania estymatorów funkcji autokorelacji.
- Omówione tu wyznaczanie niepewności u_A dla danych z samokorelacją dotyczy, podobnie jak według GUM, pomiarów modelowanych rozkładem normalnym. Postępowanie przy innych rozkładach wymaga jeszcze szczegółowego zbadania.
- Dalsze kierunki rozwoju tematyki to: opracowanie zasad obliczania w praktyce pomiarowej parametrów statystycznych dla próbek o danych z autokorelacją i zbadanie możliwości zastosowania dla nich testów statystycznych, wyznaczanie niepewności pomiarów opisanych różnymi funkcjami liniowymi i nieliniowymi, których dane zawierają składową w postaci stacjonarnej i ergodycznej lub niestacjonarnej procesu stochastycznego oraz uwzględnianie funkcji samokorelacji i korelacji w obliczeniach niepewności pomiarów wieloparametrowych i dynamicznych.
- Propozycję realizacji przyrzędu wirtualnego z wbudowaną funkcją czyszczenia surowych danych i wyznaczaniem na bieżąco niepewności mierzonego procesu opisano w [12].

5. Literatura

- [1] Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM), revised and corrected version of GUM 1995, BIPM_JCGM 100:2008.
- [2] Evaluation of measurement data - Supplement 1 to GUM - Propagation of distributions using a Monte Carlo method. BIPM - Joint Committee for Guides in Metrology JCGM: 101, 2008.
- [3] Evaluation of measurement data - Supplement 2 to GUM, Extension to any number of output quantities, BIPM JCGM 102 2011.
- [4] Wyrażanie Niepewności Pomiaru. Przewodnik. tłumaczenie wersji GUM z 1995 r. i komentarz J. Jaworskiego, Wydawnictwo Głównego Urzędu Miar, Alfavero Warszawa 1999, 2002.
- [5] Skubis T.: Podstawy metrologicznej oceny wyników pomiaru. Politechnika Śląska, Gliwice, 2004.
- [6] Rabinovich S.G.: Measurement Errors and Uncertainties. Theory and Practice. 3th ed. Springer, 2005.
- [7] Kirkup L. Frenkel B.: An Introduction to the Uncertainty in Measurement Using the GUM. Cambridge Univ. Press, Physics, 2006.
- [8] Measurement Uncertainty Analysis Principles and Methods. NASA Measurement Quality Assurance Handbook - ANNEX 3, NASA-HDBK-8739.19-3, July 2010.
- [9] Pavese F., Ichim D., SAODR: Sequence analysis for outlier data rejection. Measurement Science and Technology, vol. 15, pp. 2047-2052, 2004.
- [10] Warsza Z. L., Dorozhovets M., Korczyński M. J.: Methods of upgrading the uncertainty of type A evaluation (1). Elimination of the influence of unknown drift and harmonic components. Proc. of 15th IMEKO TC4 Symposium, Iasi Romania, pp. 193-198, 2007.
- [11] Warsza Z.L., Korczyński J.: Eliminacja wpływu nieznanego a priori składowych systematycznych na niepewność typu A pomiarów o równomiernym próbkowaniu. PAR (Pomiary Automatyka Robotyka) nr 2, 2008, s. 5 – 13.
- [12] Warsza Z. L., Korczyński J.: A New Instrument Enriched by Type A Uncertainty Evaluation. Proc. of 16th IMEKO TC4 Symposium “Exploring New Frontiers of Instrumentation and Methods for Electrical and Electronic Measurements”, 2008, Florence Italy (on CD), p.1187.
- [13] Nien Fan Zhang: Calculation of the uncertainty of the mean of autocorrelated measurements. Metrologia 43 (2006) s. 276-281.
- [14] Dorozhovets M., Warsza Z.: Propozycje rozszerzenia metod wyznaczania niepewności wyniku pomiarów według Przewodnika GUM (1) Uwzględnianie wpływu autokorelacji i nieadekwatności rozkładu wyników obserwacji w niepewności typu A. PAR nr 1, 2007 s.16-25.
- [15] Dorozhovets M., Warsza Z.: Wyznaczanie niepewności typu A pomiarów o skorelowanych rezultatach obserwacji. PAK - Pomiary Automatyka Kontrola, 2/2007 s.20-25 (oraz Przegląd EI. nr 1'2007 r.).
- [16] Witt T. J.: Using the autocorrelation function to characterize time series of voltage measurements. Metrologia 44, 2007, pp. 201-209.
- [17] Zięba A.: Effective number of observations and unbiased estimators of variance for autocorrelated data – an overview. M&MS (Metrology and Measurement Systems), 17, pp. 3-16, 2010.
- [18] Zięba A., Ramza P.: Standard deviation of the mean of autocorrelated observations estimated with the use of the autocorrelation function estimated from the data. Metrol. & Meas. Syst., 18, pp. 529-542, 2011.
- [19] Zięba A.: Niepewność pomiaru dla ciągu obserwacji samoskorelowanych. Monografia: Niepewność pomiarów w teorii i praktyce Praca zbiorowa. Główny Urząd Miar, Warszawa, 2011, s. 109-118.
- [20] Ramza P, Zięba A.: Obserwacje samoskorelowane: niepewność rozszerzona. Materiały konferencji Podstawowe Problemy Metrologii PPM'2011: Krynica-Zdrój, 12–15 czerwca 2011. Prace Oddz. PAN w Katowicach, seria Konferencje nr 15, s.43-47.
- [21] Bayley G. V. & Hammersley G. M.: The “effective” number of independent observations in an autocorrelated time-series. J. Roy. Stat. Soc. Suppl. 8, s. 184-197 (1946).
- [22] Dorozhovets M.: Wpływ braku znajomości a priori funkcji autokorelacji obserwacji na ocenę standardowej niepewności ich wartości średniej. Pomiary Automatyka Kontrola, nr 12, 2009 s. 89-92.

Uzupelniająca literatura matematyczna

- [M1] Bendat J.S., Piersol A.G.: Metody analizy i pomiaru sygnałów losowych. WNT, Warszawa, 1976 (tłumaczenie wydania z 1971r. oryginału: Random Data. Analysis and measurement procedures John Wiley & Sons N.York, Chichester, 1986).
- [M2] Korn G. A., Korn T.M.: Matematyka dla pracowników naukowych i inżynierów. PWN Warszawa 1983 (tłum. polskie oryginału: Mathematical Handbook for Scientists and Engineers McGraw-Hill, Co. N. York San Francisco, 1968).
- [M3] Tylor J.R.: Wstęp do analizy błędów pomiarowego. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1995 (tłum. oryginału ang.: An Introduction to error analysis. The study of uncertainties in physical measurements Oxford University Press California, 1982).
- [M4] Box G. E. P., Jenkins G. M., Reinsel G. C.: Time Series Analysis: Forecasting and Control. Prentice Hall, New Jersey 1994. (Wydanie wcześniejsze zostało przetłumaczone na polski jako: Analiza szeregów czasowych. Prognozowanie i sterowanie. PWN, Warszawa 1983).