1

CHYBY, VARIABILITA A NEJISTOTY INSTRUMENTÁLNÍCH MĚŘENÍ

Účelem měření je stanovení velikosti *měřené veličiny*, charakterizující určitou specifickou vlastnost. Specifikace měřené veličiny může vyžadovat i údaje o dalších veličinách jako jsou čas, teplota a tlak. Jednotlivá měření jsou obvykle zatížena celou řadou různých šumů, označovaných jako *chyby*. Výsledky měření jsou vyjádřeny pomocí vhodného odhadu střední hodnoty μ a odpovídající *nejistoty*, související s šumem, nebo-li modelem chyb[1].

Klasická statistika, vycházející z definice pravděpodobnosti jako limity relativní četnosti, poskytuje celý aparát pro vyjádření nejistoty jako intervalu spolehlivosti parametru μ. Vyjádření nejistot je filosoficky blíže subjektivní definici pravděpodobnosti jako stupni důvěry či víry. Tato pravděpodobnost však souvisí spíše s nedostatkem znalosti než s výsledkem opakovaného experimentu.

1.1 Chyby měřících přístrojů

Kvalita měřících přístrojů a výsledků měření se standardně vyjadřuje pomocí odpovídajících nepřesností, označovaných *chyby*. Chyby měření mohou být způsobeny řadou faktorů.

Dělení chyb: obecně lze chyby rozdělit podle *místa vzniku* v měřícím řetězci do čtyř základních skupin[2]:

1. *Instrumentální chyby* jsou způsobeny konstrukcí měřicího přístroje a souvisí s jeho přesností. U řady přístrojů jsou identifikovány, ale také garantovány výrobcem.
2. *Metodické chyby* souvisí s použitou metodikou stanovení výsledků měření, jako je odečítání dat, organizace měření, eliminace vnějších vlivů, atd.
3. *Teoretické chyby* souvisí s použitým postupem měření. Jde zejména o principy měření, fyzikální modely měření, použité parametry, fyzikální konstanty, atd.
4. *Chyby zpracování dat* jsou numerické chyby metody a chyby způsobené užitím nevhodného statistického vyhodnocení.

Podle *příčin vzniku* lze chyby rozdělit do tří skupin:

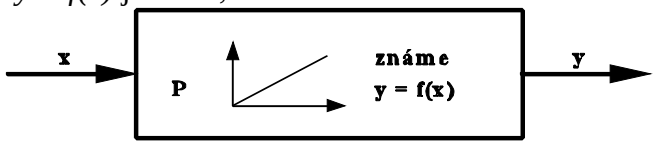
1. *Náhodné chyby*, které kolísají náhodně co do velikosti i znaménka při opakování měření, působí nepředvídatelně a jsou popsány určitým pravděpodobnostním rozdělením. Jsou výsledkem vlivu celé řady příčin, které lze jen obtížně odstranit, popř. alespoň omezit.
2. *Systematické chyby* působí na výsledek měření předvídatelným způsobem. Bývají funkcí času nebo parametrů měřicího procesu. Mívají stejná znaménka. Konstantní systematické chyby snižují nebo zvyšují numerický výsledek všech měření o stejnou velikost. Často se navenek neprojevují a lze je odhalit až při porovnání s výsledky z jiného přístroje. Existují i systematické chyby s časovým trendem, způsobené stárnutím nebo opotřebováním měřicího přístroje. Systematické chyby měřicího přístroje se dělí na *aditivní* (chyba nastavení nulové hodnoty) a *multiplikativní* (chyba citlivosti). Typ a velikost chyby přístroje bývají garantovány výrobcem.
3. *Hrubé chyby*, označované jako vybočující, resp. odlehlé hodnoty, jsou způsobeny výjimečnou příčinou, náhlým selháním měřicí aparatury, nesprávným záznamem výsledku. Způsobují, že se dané měření výrazně liší od ostatních.

Chyby se dále dělí na

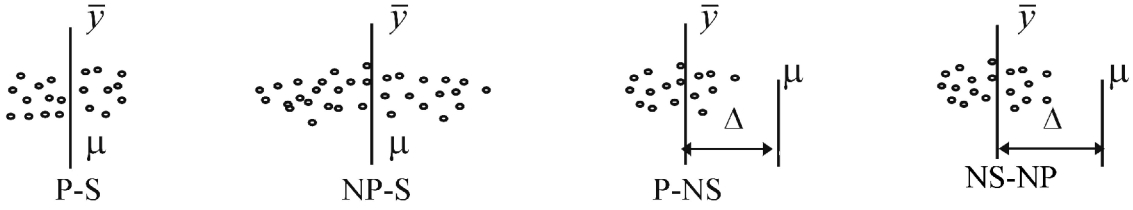
(a) *chyby výsledků měření* jako nejistoty hodnot výsledků měření, charakterizované například intervalem spolehlivosti, a

(b) *chyby měřícího přístroje* resp. *procesu* měření jako jednu z charakteristik kvality měření, udávající obyčejně přípustnou odchylku od skutečné hodnoty.

Chyba měřícího přístroje je pouze jednou součástí, ovlivňující chybu výsledků měření a vhodnou volbou přesnosti měřícího přístroje se dá její vliv silně omezit. Vstupem měřícího přístroje je *měřená veličina x* a výstupem je *výsledek měření y*. Způsob transformace *y = f(x)* je znám, obr. 1.



Obr. 1 Schéma měřícího přístroje



Obr. 2 Správnost a přesnost měření: P přesné, S správné, NP nepřesné, NS nesprávné

Pro stanovení chyb přístroje je nutné znát skutečnou hodnotu měřené veličiny μ t.zv. *etalon* nebo mít k dispozici další *velmi přesný přístroj* a získat odhad μ velmi dokonalým měřením. V obou případech je k dispozici hodnota μ nebo její odhad $\hat{\mu}$. Výsledky opakovaných měření pak umožňují určit *míry přesnosti a správnosti* měření. Obecně platí, že $y_i = g(\varepsilon_i, \mu)$, resp. pro aditivní model $y_i = \mu + \varepsilon_i$, $\{y_i, i = 1, ..., n\} \Rightarrow \bar{y}, s^2$, kde ε_i jsou šumové složky (externí zdroje nejistot) a funkce $g(\varepsilon_i, \mu)$ souvisí s modelem působení šumových složek, který může být aditivní, multiplikativní nebo kombinovaný a kde s^2 je *rozptyl* tj. měřítko přesnosti měření a *průměrná odchylka* $\bar{\Delta} = \bar{y} - \mu$ je pak měřítkem správnosti, obr. 2. S využitím hodnoty μ je možno definovat různé typy odchylek od správné hodnoty μ, které vyjadřují chyby měřícího přístroje. Rozlišujeme *absolutní odchylku* zvanou také absolutní chyba $\Delta_i = x_i - \mu$

a dále *relativní odchylku* zvanou také relativní chyba $\delta = 100\ \Delta/x$, [%]. *Celková odchylka* čili celková chyba Δ_i je

složena ze dvou složek, a to ze *systematické chyby* Δ_s a *náhodné chyby* $\Delta_{N,i}$ dle vztahu

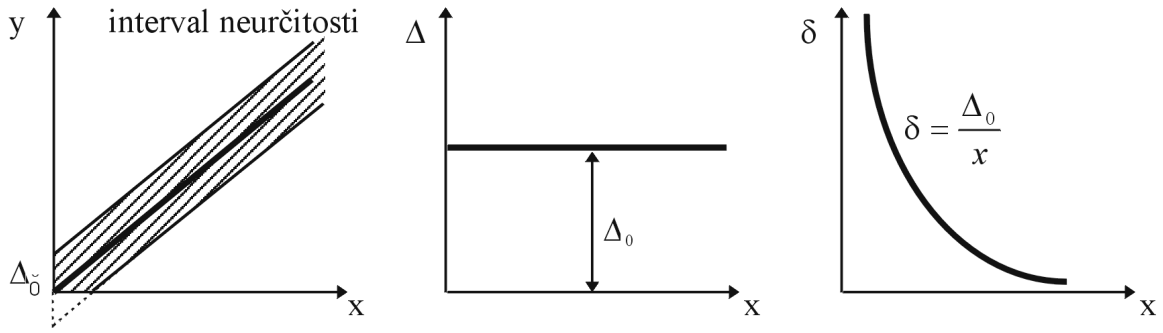
$$\Delta_i = \Delta_s + \Delta_{N,i} = \bar{y} - \mu + y_i - \bar{y}.$$

U přístrojů se obyčejně garantují různé druhy mezních chyb[3].

Mezní chyba Δ_0 měřicího přístroje je jeho nejvyšší přípustná chyba, kterou ostatní odchylky měřicího přístoje za daných podmínek prakticky nikdy nepřekročí.

Redukovaná mezní chyba $\delta_{0,R}$ měřicího přístroje pro určitou hodnotu měřené veličiny x_i a stanovené podmínky je dána poměrem mezní chyby Δ_0 a měřicího rozsahu *R*, dle vzorce $\delta_{0,R} = \Delta_0/R$. Často se redukovaná mezní chyba udává v procentech měřicího rozsahu *R*, $\delta_{0,R} = 100\Delta_0/R$, (%). Měřicí rozsah *R* je algebraický rozdíl krajních hodnot stupnice,

$R = x_{max} - x_{min}$.



Obr. 3 Konstantní absolutní chyba měření Δ_0 a relativní chyba měření δ v závislosti na měřené veličině x

Třída přesnosti měřicího přístroje: je klasifikačním znakem přesnosti v celém měřicím rozsahu přístroje. Vyjadřuje se číslem, které je vždy větší, nebo nanejvýš stejné, jako největší absolutní hodnota z redukovaných mezních chyb, zjištěných za daných podmínek v celém měřicím rozsahu přístroje. Určení třídy přesnosti záleží na typu chyby, kterou přístroj vykazuje. Dle druhu přítomné chyby rozlišujeme pak tři skupiny přístrojů:

(a) **Přístroje s konstantní absolutní chybou**: jde o přístroje, vykazující tzv. *aditivní chybu,* tj. chybu nulové hodnoty, obr. 3. V případě čistě aditivních chyb měření se užívá *redukovaná relativní odchylka* (zde přímo rovna třídě přesnosti přístroje)

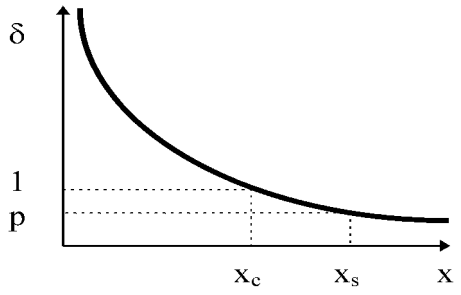
$$\delta_0 = 100 \frac{\Delta_0}{x_{\max} - x_{\min}} = 100 \frac{\Delta_0}{R}$$

kde R je rozmezí stupnice. U přístrojů, kde působí chyby měření aditivně, klesá relativní odchylka δ hyperbolicky s hodnotou x.

Metrologické vlastnosti měřicích přístrojů charakterizují také další veličiny: *prahem citlivosti* x_c se označuje vstupní hodnota, pro kterou je absolutní chyba rovna x_c, čili $\Delta_0 = x_c$, tj. relativní chyba $\delta(x_c) = 100\%$. Při znalosti třídy přesnosti δ_0 a rozmezí R se práh citlivosti vyčíslí podle vztahu $x_c = \delta_0 R/100$. Pro zajištění dostatečně malé hodnoty relativní chyby měřicího přístroje se definuje *spodní mez pracovního intervalu* x_s tak, aby relativní chyba $\delta(x_s)$ byla právě p%, obyčejně 4 nebo 10%. Platí, že

$$x_s = 100 \frac{\Delta_0}{p} = 100 \frac{x_c}{p}$$

Aditivní chyby měřicího přístroje omezují rozsah použití přístroje v oblasti malých hodnot vstupní veličiny x. Vztah mezi prahem citlivosti x_c a spodní mezí pracovního intervalu x_s vyjadřuje obr. 4.

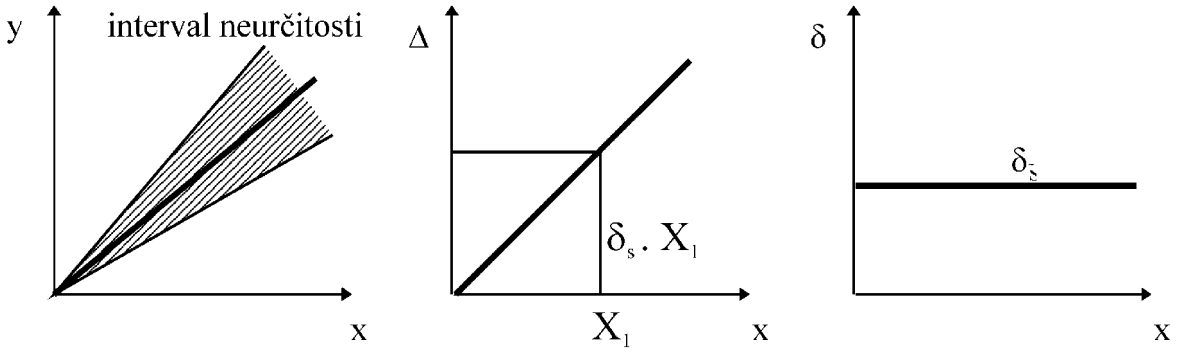


Obr. 4 Vztah mezi prahem citlivosti x_c a spodní mezí pracovního intervalu x_s

(b) **Přístroje s konstantní relativní chybou:** v případě čistě *multiplikativních chyb* měření je *relativní chyba citlivosti* (zde rovna přímo třídě přesnosti přístroje)

$$\delta_s = 100 \ \Delta_0/x$$

konstantní. V tomto případě je absolutní odchylka lineárně rostoucí funkcí vzhledem k veličině x, obr. 5.



Obr. 5 Konstantní relativní chyba měření δ_s

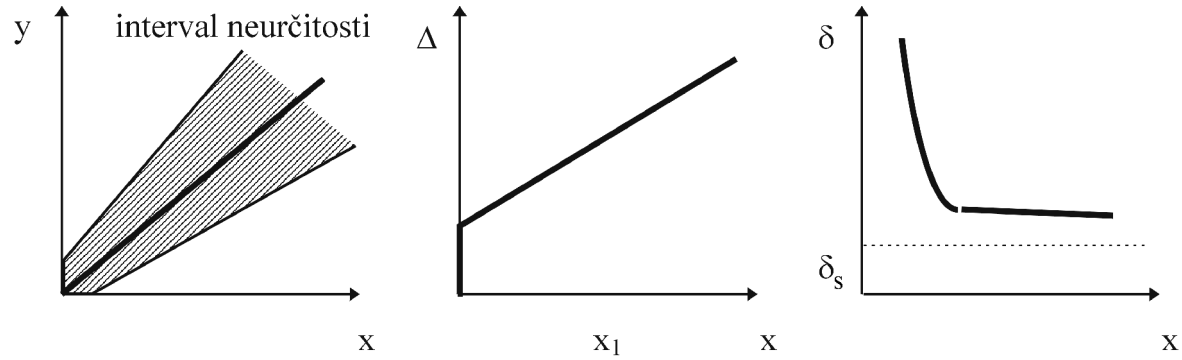
(c) **Přístroje s kombinovanými chybami**: u kombinovaných chyb měření lze *celkovou chybu* rozepsat na součet aditivní Δ_0 a multiplikativní δ_s *x* složky podle rovnice

$$\Delta = \Delta_0 + \delta_s x$$

Interval neurčitosti zvaný také *pás neurčitosti* je potom tvořen součtem ploch aditivního a multiplikativního pásu neurčitosti. *Celková redukovaná relativní chyba*

$$\delta_R = \delta_0 + \delta_s \frac{x}{R}$$

zde monotónně roste s růstem *x*. Na rozdíl od případů čistě aditivní chyby tady růst δ_R začíná tím později, čím je poměr δ_s/δ_0 větší. K vyjádření třídy přesnosti δ_k se v těchto případech užívají dva údaje: *redukovaná relativní chyba* δ_0 a *chyba vzniklá na horní hranici měřicího rozsahu* δ_s dle vzorce $\delta_k = \delta_0 + \delta_s$. Jde o případ tzv. kombinovaného působení aditivní a multiplikativní chyby, obr. 6.



Obr. 6 Kombinované působení aditivní a multiplikativní chyby měření $\delta_0 + \delta_s$

1.2 Způsoby vyjádření odhadů chyb měření

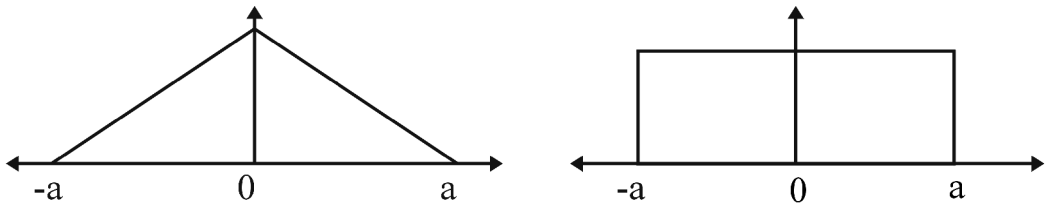
K vyjádření absolutních chyb měření Δ se nejčastěji využívá pravděpodobnostní přístup, vycházející ze znalosti pravděpodobnostního zákona rozdělení chyb, vyjádřeného hustotou pravděpodobnosti *f(Δ)*. To umožňuje zahrnutí systematické složky chyb jako *střední hodnoty chyb* a náhodné složky chyb jako relativní šířky rozdělení, vyjádřené *rozptylem* či ostatními mírami rozptýlení. Lze použít také nepravděpodobnostní přístup, založený na *intervalové analýze.*

Pro praktický odhad chyb měření Δ, a to i přístrojových chyb, lze užít celou řadu charakteristik, počítaných z výběrových hodnot chyb $\Delta_i = x_i - \mu_s$, kde μ_s je buď hodnota standardu nebo odhad skutečné hodnoty μ.

Základní charakteristiky polohy a rozptýlení chyb vycházejí ze znalosti hustoty pravděpodobnosti chyb *f(Δ)*:

1. *Momenty* jsou jednak *obecné* typu $M_K(x) = \int x^K f(x)\, dx$, jednak *centrální* typu $c_K(x) = \int [x - M_1(x)]^K f(x)\, dx$.

2. *Speciální míry rozptýlení* jsou založené na volbě vhodného aproximujícího rozdělení. Pokud je znám pouze interval chyb $-a \le \Delta \le a$, resp. pouze *mezní odchylka a* volí se buď trojúhelníkové nebo rovnoměrné rozdělení hustoty pravděpodobnosti *f(Δ)*, obr. 7.



Obr. 7 Hustota pravděpodobnosti pro trojúhelníkové a rovnoměrné rozdělení

V obou případech je *střední hodnota chyb E(Δ)* = 0 a *směrodatná odchylka* pro

(a) pro rovnoměrné rozdělení rovna $\sigma_R = a/\sqrt{3} \approx 0.5774a$, a pro

(b) trojúhelníkové rozdělení $\sigma_T = a/2\sqrt{6} \approx 0.2041a$.

Jako míra rozptýlení se pak bere buď σ_R nebo σ_T podle toho, které z těchto rozdělení lépe vystihuje daný problém (jde vlastně o výpočet *nejistoty typu B*).

3. *Pravděpodobnost* $P(a \le \Delta \le b)$, s jakou chyby leží ve zvoleném intervalu [*a, b*].

4. *Kvantily*, tj. hodnoty chyb $\tilde{\Delta}_\alpha$, pro které platí, že $P(\Delta \le \tilde{\Delta}_\alpha) = \alpha$. To znamená, že α% všech chyb leží pod hodnotou $\tilde{\Delta}_\alpha$.

Je zřejmé, že pravděpodobnosti a kvantily spolu vzájemně souvisí. Např. předpoklad symetrického rozdělení umožňuje stanovení mezí [*a, b*] jako speciálních kvantilů, pro které je pravděpodobnost $P(\Delta \le a) = \alpha/2$ a pravděpodobnost $P(\Delta \le b) = 1 - \alpha/2$.

Obecně lze pro tyto charakteristiky definovat jistý interval $[a^-, b^+]$ jejich možných hodnot. Pro případ, že je známa hustota pravděpodobnosti *f(Δ)* lze tuto úlohu řešit pomocí standardních statistických metod (tj. *intervalů spolehlivosti*). Další možností je použití metodiky stanovení neurčitosti výsledků měření. Při nepravděpodobnostním přístupu lze využít také intervalové analýzy.

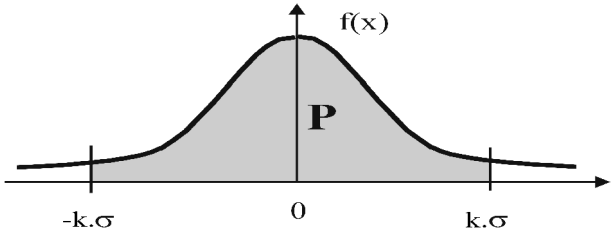
1.2.1 Momentové odhady chyb

Obecně lze při znalosti chyb Δ_i, $i = 1, ..., n$, určit odpovídající rozptyl σ_Δ^2. Na základě představy, že měření je vyjádřeno jednoduchým aditivním modelem $x_i = \mu + \Delta_i$, lze snadno určit rozptyl měřené veličiny *x* jako σ^2. Pokud platí, že $\bar{\Delta} = 0$ (střední hodnota chyb je rovna nule, *E(Δ)* = 0, t. zn. že systematická složka chyby je nulová) je $\sigma_\Delta = \sigma$, kde

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1}(x_i - \bar{x})^2}.$$

Pravděpodobnostní interval chyb: předpokládejme, že chyby mají symetrickou hustotu pravděpodobnosti *f(Δ)* se střední hodnotou *E*(Δ) = 0. Nechť je známa i distribuční funkce *F(Δ)*. Pro pravděpodobnostní interval, ve kterém leží 100(1 - α)% všech chyb platí

$$P = (-k\sigma \le \Delta \le k\sigma) = F(k\sigma) - F(-k\sigma) = 1 - 2F(-k\sigma) = 1 - \alpha$$



Obr 8. Pravděpodobnostní interval chyb

Zde *-k* představuje α kvantil, *k* je 1 - α kvantil standardizovaného rozdělení chyb a *σ* je směrodatná odchylka. Pro řadu rozdělení platí, že pro *P* = 0.9 je $|k| = 1.64$, takže *pravděpodobnostní interval náhodné chyby Δ* se vyjádří nerovností

$$-1.64\,\sigma \le \Delta \le 1.64\,\sigma$$

Toleranční interval chyb: je-li znám pouze odhad směrodatné odchylky *s* a je-li střední hodnota chyb opět nulová $E(\Delta) = 0$, vyjádří se *toleranční interval náhodné chyby* Δ nerovností

$$-k_T\, s \;\le\; \Delta \;\le\; k_T\, s$$

kde za předpokladu normálního rozdělení chyb bude

$$k_T = u_{(1+P)/2}\sqrt{\frac{n-1}{\chi^2_\alpha(n-1)}}$$

a χ^2_α je α-kvantil χ^2 rozdělení. Platí pravidlo, že *toleranční intervaly jsou vždy širší než intervaly pravděpodobnostní*.

Kombinace rozptylů: výsledný rozptyl σ_V^2 se vyčíslí na základě propagace rozptylů z *m* zdrojů

$$\sigma_V^2 = \sum_{i=1}^{m}\sigma_i^2 + 2\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=i+1}^{m} cov(x_i,\, x_j),$$

kde σ_i^2 je rozptyl, způsobený *i*-tým zdrojem, $cov(x_i, x_j)$ je kovariance mezi *i*-tým a *j*-tým zdrojem. Potom platí, že pro

a) vzájemně *nezávislé rozptyly*, kdy $cov(x_i, x_j) = 0$ vyjde *kvadratický průměr rozptylů* dle vzorce $\sigma_{VN} = \sqrt{\sum_{i=1}^{m}\sigma_i^2}$,

b) *lineárně závislé rozptyly*, kdy $cov(x_i, x_j) = \sigma_i\,\sigma_j$ vyjde až na konstantu *aritmetický průměr rozptylů* dle vzorce $\sigma_{VL} = \sum_{i=1}^{m}\sigma_i$. Ze známé trojúhelníkové nerovnosti plyne, že $\sqrt{\sum\sigma^2} < \sum\sigma_i$. V souladu s tím, že se připouští vždy horší varianta, je vhodné volit v případech, kdy nejsou o korelacích mezi zdroji chyb žádné informace jako celkovou směrodatnou odchylku σ_{VL}.

Volba měřícího přístroje vzhledem k chybám měření: celková chyba měření σ_V pro případ, že *variabilita měřeného materiálu* vyjádřená *rozptylem* σ^2 a *rozptyl měřícího přístroje* τ^2 pocházejí z nezávislých zdrojů, se vyčíslí výrazem

$$\sigma_V^2 = \sigma^2 + \tau^2.$$

Celková chyba měření bude přitom záviset na volbě přístroje:

1. Pro *velmi přesný přístroj* je složka chyby τ zanedbatelně malá a proto platí $\sigma_V = \sigma$. Opakováním lze zlepšit přesnost měření.

2. Pro *optimální přístroj* platí $\tau \approx \sigma/3$ a pak bude celková chyba měření rovna

$$\sigma_V = \sqrt{\sigma^2 + \sigma^2/3} = \sigma\sqrt{10/9} \approx \sigma.$$

3. Pro *srovnatelné chyby* platí $\tau \approx \sigma$, a pak bude celková chyba měření rovna $\sigma_V = \sqrt{2}\,\sigma = 1.44\,\sigma$.

4. Pro *nepřesný přístroj* platí $\sigma_V \approx \tau$, a opakováním měření nelze přesnost zlepšit.

Pravidla o chybách měření: při měření je vhodné respektovat pravidla o chybách:

(a) Při měření veličin x_1 a x_2, které se pro získání výsledku sčítají či odčítají $y = x_1 \pm x_2$ dbáme, aby oba sčítance x_1 a x_2 byly měřeny se stejnou absolutní přesností. Je-li chyba jedné z nich mnohem větší, rozhoduje pak sama o chybě výsledku *y*.

(b) Je-li výsledkem sčítání či odčítání malá hodnota $y = x_1 \pm x_2$, je výsledek zatížen velkou relativní chybou. Tomu se vyhýbáme a malé hodnoty se snažíme měřit přímo.

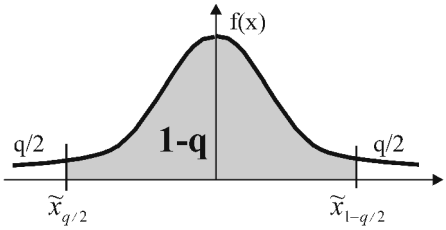
(c) Při měření veličin x_1 a x_2, které pro získání výsledku násobíme $y = x_1 * x_2$ nebo dělíme $y = x_1 / x_2$ by měly být obě veličiny x_1 a x_2 stejné relativní přesnosti. V případě součinu mocnin s různými exponenty je výhodnější, jsou-li relativní chyby nepřímo úměrné příslušným exponentům, aby součin exponentu a relativní chyby byl přibližně konstantní.

1.2.2 Kvantilové odhady chyb

Uvažujme stejnou situaci jako u momentových odhadů, tj. *směrodatná odchylka měření* σ je přímo rovna *střední kvadratické chybě* σ_Δ, čili $\sigma = \sigma_\Delta$. Jednou z jednoduchých charakteristik rozptýlení je tzv. *interkvantilová odchylka*

$$K_{1-q} = (\tilde{x}_{1-q/2} - \tilde{x}_{q/2}).$$

Zde $\tilde{x}_\alpha$ představuje obecně kvantil rozdělení chyb, ve kterém leží 100α% všech chyb. Hodnota K_{1-q} definuje interval, ve kterém leží P =100(1 - q)% chyb.



Obr 9. Kvantilový interval chyb

Pro zvolenou pravděpodobnost čili statistickou jistotu $P = 1 - q$ je pak *mezní chyba měření* rovna $\Delta_{\Delta P} = K_{1-q}$ a odpovídá intervalu obsahujícímu 100(1 - q)% všech chyb. Její velikost obecně závisí na hodnotě q a na konkrétním zákonu rozdělení chyb. Pro vybrané hodnoty pravděpodobnosti P je v praxo zavedeno specifické označení dotyčné chyby:

(a) *Střední chyba* (P = 0.5): $\sigma_{\Delta\ 0.5} = (\tilde{x}_{0.75} - \tilde{x}_{0.25})/2$, užívá se pro normální rozdělení platí $\sigma_{\Delta\ 0.5} = 0.68\ \sigma$.

(b) *Pravděpodobná chyba* (P = 0.683): $\sigma_{\Delta\ 0.683} = (\tilde{x}_{0.8415} - \tilde{x}_{0.1585})/2$, užívá se pro normální rozdělení platí $\sigma_{\Delta\ 0.683} = \sigma$.

(c) *Chyba pro libovolné neznámé rozdělení* (P = 0.9): $\sigma_{\Delta\ 0.9} = (\tilde{x}_{0.95} - \tilde{x}_{0.05})/2$.

Pro řadu rozdělení platí, že $\sigma_{\Delta\ 0.9} = 1.65\ \sigma$, a proto je pro sčítání dílčích kvantilových chyb vhodné využít vztahu $\sigma_{\Delta\ 0.9} = \sqrt{\sum \sigma^2_{\Delta\ 0.9,i}}$. V případě, kdy chyby měření mají normální rozdělení, lze psát $\sigma_{\Delta P} = u_{(1+P)/2}\ \sigma$, kde $u_{(1+P)/2}$ je 100(1+P/2)%ní kvantil normovaného normálního rozdělení. Pro ostatní rozdělení platí, že mezní kvantilovou chybu $\sigma_{\Delta P}$ lze vyjádřit vztahem $\sigma_{\Delta P} = h\ \sigma$. Velikost h souvisí se špičatostí $g_2$daného rozdělení chyb vztahem

$$h \approx 1.62[3.8(g_2 - 1.6)^{2/3}]^Z, \quad \text{kde} \quad Z = \log[\log(1/(1 - P))].$$

Je třeba ale zdůraznit, že kvantilové chyby $\sigma_{\Delta P}$ nelze obecně sčítat.

1.2.3 Nepravděpodobnostní intervalové odhady chyb

V některých případech chybí o příčinách nejistoty proměnných pravděpodobnostní informace. Pro každou proměnnou x_j se dá pouze vyjádřit ohraničení ve tvaru $[a_j^D \le x_j \le a_j^H]$, kde a_j^D je dolní mezní hodnota a a_j^H je horní mezní hodnota proměnné x_j. Tímto intervalem lze definovat tzv. *intervalové proměnné*. Pro intervalové proměnné platí obecně $A = [a_1, a_2]$ pro $s \in \{a_1 \le a_2\}$. Pro kombinaci intervalových proměnných A a B lze použít intervalové aritmetiky. Platí, že

$$A + B = [a_1, a_2] + [b_1, b_2] = [a_1 + b_1, a_2 + b_2],$$
$$A - B = [a_1, a_2] - [b_1, b_2] = [a_1 - b_2, a_2 + b_1]$$
$$A * B = [a_1, a_2] * [b_1, b_2] =$$
$$[\min(a_1 * b_1, a_2 * b_2, a_2 * b_1, a_2 * b_2),$$
$$\max(a_1 * b_1, a_1 * b_2, a_2 * b_1, a_2 * b_1, a_2 * b_2)]$$
$$A/B = [a_1, a_2]/[b_1, b_2] = [a_1, a_2] * [1/-b_2, 1/b_1]$$

Tato aritmetika se dá použít v jednodušších situacích pro stanovení intervalů chyb měření.

1.3 Propagace chyb a nejistot

1.3.1 Metoda Taylorova rozvoje

Případ jedné přímo měřené veličiny *x*: uvažujme nejdříve případ jedné přímo měřené veličiny *x*, kdy výsledky měření jsou $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots n$, a z nich se určují odhady $\bar{x}$, s_x^2. Výsledek nepřímých měření je vyjádřen známou funkcí $y = f(x)$. Obecně zde značí "f(.)" nelineární funkci, a proto platí, že $\bar{y} \neq f(\bar{x})$. Odhad $\bar{y}$, s_y^2 se provádí s využitím Taylorova rozvoje $f(x)$ v okolí $\bar{x}$

$$f(x) \approx f(\bar{x}) + \frac{1}{1!}\frac{df(x)}{dx}(x - \bar{x}) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}(x - \bar{x})^2 + \ldots$$

$$E(f(x)) \equiv \bar{y} \approx f(\bar{x}) + \frac{df(x)}{dx}E(x - \bar{x}) + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}E(x - \bar{x})^2$$

$$\bar{y} \approx f(\bar{x}) + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}.s_x^2$$

$$D(f(x) - f(\bar{x})) \equiv s_y^2 \approx D\left[\frac{df(x)}{dx}(x - \bar{x})\right]$$

$$s_y^2 \approx \left\{\frac{df(x)}{dx}\right\}^2 s_x^2$$

Případ více měřených proměnných: výsledkem více nepřímých měření je pak funkční vztah $f(x_1, \ldots, x_m)$. Ze známých výsledků více přímých měření se určí $\bar{x}_1, s_{x_1}^2, \ldots, \bar{x}_m, s_{x_m}^2$. Označme zde vektor průměrů symbolem $\bar{\boldsymbol{x}} = (\bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_m)$. Pro Taylorův rozvoj pak platí

$$f(\boldsymbol{x}) \approx f(\bar{\boldsymbol{x}}) + \sum_{i=1}^{m}\frac{df(\boldsymbol{x})}{dx_i}(x_i - \bar{x}_i) +$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\frac{d^2 f(\boldsymbol{x})}{dx_i^2}(x_i - \bar{x}_i)^2 + \sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j>i}^{m}\frac{d^2 f(\boldsymbol{x})}{dx_i\, dx_j}(x_i - \bar{x}_i)(x_j - \bar{x}_j) + \ldots$$

$$\bar{y} \approx f(\bar{\boldsymbol{x}}) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\frac{d^2 f(\boldsymbol{x})}{dx_i^2}s_{x_i}^2 + \sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=i+1}^{m}\frac{d^2 f(\boldsymbol{x})}{dx_i\, dx_j}cov(x_i, x_j)$$

$$s_y^2 = \sum_{i=1}^{m}\left[\frac{df(x)}{dx_i}\right]^2 s_{x_i}^2 + 2\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j>i}^{m}\left[\frac{df(x)}{dx_i}\frac{df(x)}{dx_j}\right]cov\,(x_i, x_j)$$

kde $\mathrm{cov}(x_i, x_j)$ je kovariance mezi veličinami x_i a x_j. Existují dva krajní případy pro $s^2{}_y$:

1. Dílčí zdroje chyb jsou zcela nezávislé a všechny kovariance $cov(x_i, x_j) = 0$ jsou nulové. Celková chyba $s_y = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} s_{x_i}^2}$ bude úměrná kvadratickému průměru dílčích chyb ze všech *m* zdrojů.

2. Dílčí zdroje chyb jsou lineárně závislé a platí, že $cov(x_i, x_j) = \sqrt{s_{x_i}^2\, s_{x_j}^2}$. Celková chyba s_y bude nyní úměrná aritmetickému průměru všech dílčích chyb $s_y = \sum_{i=1}^{m} s_{x_i}$.

Případ mocninné transformace $\bar{y} = f(x) = x^P$: pokud *x* mělo symetrické rozdělení s konstantním rozptylem $\sigma_x{}^2$, bude rozdělení *y* nesymetrické s nekonstantním rozptylem.

$$\sigma_y^2 \approx \left(\frac{\delta x^P}{\delta x} \right)^2 \sigma_x^2 = P^2 \; x^{2(P-1)} \; \sigma_x^2$$

Z Taylorova rozvoje pak vyjde

$$\bar{y} \approx \bar{x}^P + \frac{P(P-1)}{2} \bar{x}^{(P-2)} s_x^2 = \bar{x}^P \left[1 + \frac{P(P-1)}{2} s^2 \right]$$

Použití symetrizační transformace

$$Z = f(x)^{1/P} = y^{1/P} \; ,$$

kde *Z* již má symetrické rozdělení a tedy přibližně platí, že $\bar{Z} = \frac{1}{n} \sum Z_i$. Z toho pak plyne přibližný výraz

$$\bar{y} = \left[\frac{1}{n} \sum y_i^{1/P} \right]^P \; .$$

Platí, že pro $P = 1$ jde o *aritmetický průměr*, pro $P = -1$ o *harmonický průměr*, pro $P = 2$ o *kvadratický průměr*. Dle typu mocniny lze zvolit odpovídající průměr.

1.3.2 Metoda dvoubodové aproximace

Postup je založen na náhradě rozdělení pravděpodobnosti funkce *f(x)* dvoubodovým rozdělením se stejnou střední hodnotou a rozptylem[7]. Pro *odhad střední hodnoty* $\bar{y}$ platí

$$\bar{y} \approx \frac{f(\bar{x} + s(x)) + f(\bar{x} - s(x))}{2}$$

a pro *odhad rozptylu*

$$s^2(y) \approx \frac{[f(\bar{x} + s(x)) - f(\bar{x} - s(x))]^2}{4}$$

Je-li ***f(x)*** funkcí *m nezávislých,* náhodných a vzájemně nekorelovaných veličin x_i, $i = 1,..., m$, je možné užít následujících vztahů

pro *odhad střední hodnoty* $\bar{y} \approx \sum_{i=1}^{m} \frac{f(\bar{x}_i + s(x_i)) + f(\bar{x}_i - s(x_i))}{2 \; m}$

a pro *odhad rozptylu* $s^2(y) \approx \sum_{i=1}^{m} \frac{[f(\bar{x}_i + s(x_i)) - f(\bar{x}_i - s(x_i))]^2}{4 \; m}$.

1.3.3 Metoda simulací Monte Carlo

Při určování středních hodnot $\bar{y}$ a rozptylů $\sigma^2(y)$ jako funkcí náhodných veličin počítačem je výhodné použít techniky simulačních experimentů metodou Monte Carlo. Postup lze shrnout do pěti kroků[8]:

1. *Zadání funkce f(x)*: v úlohách přírodních věd bývá funkce *f(x)* většinou známa. Výhodou simulace je, že funkce *f(x)* nemusí být vyjádřena v explicitním tvaru.

2. *Rozdělení měřených veličin*: předpokládá se, že měřené veličiny jsou nezávislé a mají normální rozdělení pravděpodobnosti. Stačí zadání veličin $\bar{x}_i$, $s(x_i)$, $i = 1, ..., m$. Pokud nejsou tyto veličiny k dispozici, postačují dvě krajní hodnoty intervalu $[A_i, B_i]$, ve kterém lze očekávat výskyt měřené veličiny x_i. Aproximativní hustotu pravděpodobnosti $f(x_i)$ lze vyjádřit pomocí parabolického rozdělení

$$f(x_i) = \frac{6}{(B - A)^2} (x_i - A) \; (B - x_i) \quad \text{pro } A \le x_i \le B.$$

Složitější bude situace, kdy se mezi vstupními měřenými veličinami x_i vyskytnou korelace. Pak je třeba specifikovat simultánní rozdělení všech hodnot x_i, $i = 1, ..., m$, což bude jednoduché pouze pro případ normálního rozdělení.

3. *Generace náhodných čísel*: na počítačích existují kvalitní generátory pseudonáhod-ných čísel s rovnoměrným rozdělením $R[0, 1]$. Při znalosti dvou nezávislých náhodných čísel R_j, R_{j+1} s rovnoměrným rozdělením lze pomocí Boxovy-Müllerovy transformace určit dvě nezávislá náhodná čísla N_j, N_{j+1} s normovaným normálním rozdělením podle

$$N_j = \sqrt{-2 \ln R_j}\, \sin(2 \pi R_{j+1}) \quad \text{a} \quad N_{j+1} = \sqrt{-2 \ln R_j}\, \cos(2 \pi R_{j+1}) \ .$$

Pak j-tá simulovaná hodnota i-té veličiny x_i bude vyjádřena $x_{i,j}^{*} = N_j\, s(x_i) + \bar{x}_i$. Pro parabolické rozdělení bude simulovaná hodnota $x_{i,j}$* řešením kubické rovnice

$$0.5\, x_{i,j}^{*2} - x_{i,j}^{*} - \frac{x_{i,j}^{*3}}{3} + \alpha = R_i\, ß \ , \text{kde} \quad \alpha = A^3 - A^2 + A \qquad \beta = \frac{6}{(B - A)^2} \ .$$

4. *Volba počtu simulací*: pravidla pro určení nezbytného počtu simulací jsou stejná jako pravidla pro určování velikosti výběru. Jde-li o odhad střední hodnoty a pokud lze definovat požadovanou šířku $100(1 - \alpha)\%$ ního intervalu spolehlivosti D, platí pro minimální počet simulací vztah $n_{\min} = \left[\frac{4\, u_{1-\alpha/2}^2}{D^2}\, s^2(y) \right] + 1$, kde $u_{1-\alpha/2}$ je kvantil normovaného normálního rozdělení a $s^2(y)$ je odhad rozptylu určený např. z prvních 50 simulací.

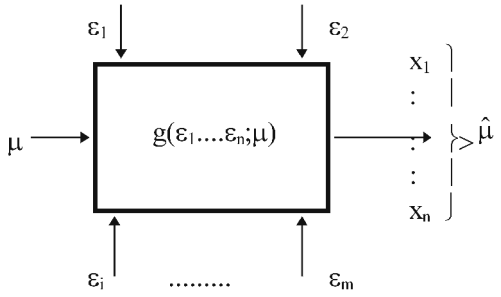
5. *Sumarizace výsledků*: s ohledem na maximální univerzálnost je výhodné nalézt empirickou hustotu pravděpodobnosti rozdělení souboru simulovaných hodnot y_j*, $j = 1, ..., n_{min}$, a pak vyčíslit odhady parametrů polohy a rozptýlení.

1.4 Nejistoty výsledků měření

Jsou porovnány postupy k určování nejistot, a s tím spojené v literatuře nově zaváděné terminologie s terminologií statistické analýzy. Zvolený přístup výpočtu nejistot je silně závislý na předpokladech o vzniku a vlastnostech jednotlivých nejistot. *Nejistoty* v nově zaváděné terminologii představují vlastně *intervaly spolehlivosti* ve statistické analýze. Základní rozdíl je pak v užívání neexperimentálních informací o zdrojích variability.

1.4.1 Porovnání přístupů k výpočtu nejistot

A. Přímá měření: pro případ řady zdrojů chyb měřícího systému pro přímá měření je situace znázorněna obr. 10



Obr. 10 Blokové schéma měřícího systému pro přímá měření

Zde μ je měřená veličina, $\varepsilon_1, \varepsilon_2, ... , \varepsilon_m$ jsou šumové složky, nazývané externí zdroje nejistot a funkce $g(\varepsilon_1, \varepsilon_2, ..., \varepsilon_m , \mu)$ souvisí s modelem působení šumových složek, které může být aditivní, multipikativní a kombinované.

1. Analýza nejistot podle standardní statistické analýzy, cit. [15, 16]:

a) *Odhad veličiny* μ (bodový), viz. kap. 3.

b) *Odhad rozptylu* σ^2 (bodový), viz. kap. 3.

c) *Odhad intervalu spolehlivosti (IS)* pro μ, viz. kap. 3.

d) *Odhad vychýlení* $b = E(\mu - \hat{\mu})$, viz. kap. 3.

Obecně je třeba připustit, že odhad $\hat{\mu}$ je vychýlený, tj. střední hodnota $E(\hat{\mu}) \neq \mu$. Pak je mírou celkové variability *střední kvadratická chyba MSE*, pro kterou platí

$$MSE = E(\mu - \hat{\mu})^2 = E[\mu - E(\hat{\mu})]^2 + E[\hat{\mu} - E(\hat{\mu})]^2 = D(\hat{\mu}) + b^2$$

a která je rovna součtu rozptylu $D(\hat{\mu})$ a čtverce vychýlení b^2.

2. Analýza nejistot podle nové terminologie, cit. [11, 12]:

a) *Odhad veličiny* μ (bodový): i když v nové literatuře není obvykle model speciálně uveden, předpokládá se aditivní model $x_i = \mu + \sum_{i=1}^{m} \varepsilon_i$, kde šumy mají nulové střední hodnoty $E(\varepsilon_i) = 0$ a konstantní rozptyly $D(\varepsilon_i) = \sigma_i^2$. Pak rezultuje známý odhad střední hodnoty ve formě aritmetického průměru, $\hat{\mu} = \bar{x}$.

b) *Odhad rozptylu* $D(\hat{\mu})$*:* předpokládá se nezávislost (případně pouze lineární závislost všech složek šumu) ε_i . Jsou užívány následující míry rozptýlení:

Standardní nejistota typu A, u_{Ai}, tj. směrodatná odchylka *měřené* šumové složky se počítá jako odmocnina z výběrového rozptylu.

Standardní nejistota typu B, u_{Bi}, tj. směrodatná odchylka *neměřené* a v experimentu nesledované šumové složky, která se odhaduje jako směrodatná odchylka, odpovídající jejímu apriorně vybranému rozdělení. Řada odhadů pro apriorní rozdělení rovnoměrné, trojúhelníkové, lichoběžníkové a normální je uvedena v literatuře[11, 12].

Místo odhadu $D(\hat{\mu})$ se používá *kombinovaná standardní nejistota* u_c vycházející z platnosti výše uvedeného aditivního modelu

$$u_c^2 = \Sigma\, u_{Ai}^2 + \Sigma\, u_{Bi}^2 .$$

Pro závislé zdroje nejistot se přičítají ještě kovariance.

c) *Odhad intervalu spolehlivosti (IS)* pro μ: předpokládá se přibližná normalita, zřejmě plynoucí z centrální limitní věty. *Rozšířená nejistota*, formálně totiž poloviční šířka intervalu spolehlivosti pro μ, je pak $U = 2\, u_c$. Problémem však je, že v řadě případů některé standardní nejistoty dominují a pak již představu normality z centrální limitní věty nelze aplikovat.

d) *Odhad vychýlení* $b = E(\mu - \hat{\mu})$: vůbec se neuvažuje. Předpokládá se, že vychýlení U je odstraněno v rámci metody měření. V práci Phillipse a ost.[14] je navržen postup výpočtu nejistot pro případy, kdy vychýlení b eliminováno není. Jednoduše se vytvoří dvě rozšířené nejistoty

$U_+ = U - b$ pro $U - b > 0$, resp. $U_+ = 0$

$U_- = U + b$ pro $U + b > 0$, resp $U_- = 0$.

To pak pochopitelně vede k nesymetrickému intervalu spolehlivosti.

B. Nepřímá měření: Výsledek analýzy $f(\mu_1, ..., \mu_m)$ je vytvořen známou funkcí skutečných výsledků přímých měření $\mu_1, ..., \mu_m$, (např. měříme poloměr a chceme znát plochu příčného řezu kruhových vláken). K dispozici jsou odhady parametrů ($\hat{\mu}_1$, $\hat{\mu}_2$, ..., $\hat{\mu}_m$) a příslušné odhady rozptylů, resp. čtverců nejistot,

$$D(\hat{\mu}_1),\ D(\hat{\mu}_2),\ ...,\ D(\hat{\mu}_m).$$

1. Analýza nejistot podle standardní statistické analýzy, cit. [15, 16]:

a) *Odhad y z odhadů* $\hat{\mu}_i$, $i = 1, ..., m$, viz. kap. 1.3.

b) *Odhad rozptylu* $D(\hat{y})$, viz. kap. 1.3.

c) *Odhad intervalu spolehlivosti pro y*, viz. kap. 1.3.

2. Analýza nejistot podle nové terminologie, cit. [11, 12]:

a) *Odhad y z odhadů* $\hat{\mu}_i$, $i = 1, ..., m$: není řešen přímo, ale velmi aproximativně se předpokládá $\hat{y} = f(\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2, ..., \hat{\mu}_m)$.

b) *Odhad rozptylu* $D(\hat{y})$: je to vlastně *rozšířená nejistota u(y)*. Vychází se z předpokladu, že $f(\boldsymbol{x})$ lze nahradit linearizací Taylorovým rozvojem v okolí $\boldsymbol{\mu}$

$$y = f(\boldsymbol{x}) \approx f(\boldsymbol{\mu}) + \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{df(.)}{dx_i} \right) (x_i - \mu_i)$$

$$D(y) \approx \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{df(.)}{dx_i} \right)^2 D(x_i) + cov(...)$$

$$u^2(y) \approx \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{df(.)}{dx_i} \right)^2 u^2(x_i) + cov(...)$$

D(y) se obvykle nesprávně označuje jako *zákon šíření nejistot*. V případě, že zdroje nejistot jsou lineárně závislé, provádí se korekce s využitím kovariancí *cov*(...). Linearizace může však být v řadě případů velmi nepřesná.

c) *Odhad intervalu spolehlivosti* pro *y*: předpokládá se téměř vždy nekorektně přibližná normalita. Nelineární funkce normálně rozdělených náhodných veličin totiž normální rozdělení nemá. Polovina 95%ního intervalu spolehlivosti čili *rozšířená nejistota* je potom *U = 2 u(y)*. Zde 2 či přesněji 1.96 představuje *kvantil normovaného normálního rozdělení*. Pro nelineární transformaci však rezultují nesymetrická rozdělení, což vede k nesymetrickému intervalu spolehlivosti. Ve speciálních případech (např. stopová analýza v analytické chemii) to může výrazně ovlivnit závěry: pro positivně sešikmená rozdělení vyjde totiž ve směru k nižším hodnotám korektnější interval užší a ve směru k vyšším hodnotám širší.

1.4.2 Kritické poznámky k výpočtu nejistot

a) Poznámky terminologické: následující převodní tabulka ukazuje, že termíny doporučované v některé literatuře odpovídají vlastně běžným pojmům, užívaným ve statistice:

Nová terminologie:	**Statistika:**
Standardní nejistota A	*směrodatná odchylka měřené šumové složky* s
Standardní nejistota B	*směrodatná odchylka (odhadnutá) šumové složky* s
Kombinovaná nejistota	*směrodatná odchylka funkce y, s(y)*
Rozšířená nejistota	*polovina intervalu spolehlivosti IS*
Faktor pokrytí	*kvantil normovaného normálního rozdělení* α

b) Poznámky statistické: výpočty v některých odkazech literatury vycházejí z předpokladů, které však nejsou v procesu navrhovaného výpočtu nikterak ověřovány:

a) aditivní model měření resp. působení šumových složek (zdrojů nejistot),

b) konstantní rozptyl měření (resp. zdrojů nejistot),

c) normalita nelineární funkce normálně rozdělených proměnných (pro určení rozšířené nejistoty resp. intervalu spolehlivosti IS),

d) nekorelovanost měření,

e) malá nelinearita funkce *f(x)*, umožňující použití její linearizace,

Problémem je nekorektnost při konstrukci a interpretaci *rozšířené nejistoty U* (resp. intervalu spolehlivosti IS). Klasická statistika vede totiž k tomu, že pro $n \to \infty$ je $100(1 - \alpha)\%$*ní interval spolehlivosti parametru* μ roven výrazu

$$\hat{\mu} \pm u_{1-\alpha/2} \sqrt{D(\hat{\mu})}.$$

Při výpočtu nejistot není *kombinovaná nejistota* u_c^2 pouze odhadem rozptylu $D(\hat{\mu})$, ale obsahuje ještě další složky. Pak vyjde *rozšířená nejistota U* **systematicky vyšší** než polovina intervalu spolehlivosti, hodnota 2 zde nezajišťuje přibližně 95%ní pokrytí a interpretace takového intervalu je nesnadná.

c) Poznámky výpočetní: místo náhrady derivací diferencemi, jak se často doporučuje v různých příručkách, by bylo podstatně jednodušší užít *simulace* nebo tzv. *Bootstrap odhadů* zejména pak, užívá-li se počítač.

1.4.3 Přístup intervalové analýzy k nejistotám

V praxi obvykle není známo rozdělení měřených veličin *x* resp. chyb měření Δ, takže analýza nejistot založená na pravděpodobnostních předpokladech je silně omezená. Při intervalové analýze se k "průměrnému" výsledku měření $\bar{x}$

musí definovat *mezní odchylka* (*chyba*) *d* a výsledek vyjádřit jako interval. Zde *X* označuje tzv. *intervalovou proměnnou* $X = [\bar{x} - d, \bar{x} + d]$.

V případě, že se vyjadřuje interval neurčitosti absolutní chyby, je $\bar{x} = 0$ a platí, že $X = [-d, +d]$. V obecnějším případě může být hraniční chyba funkcí úrovně měřené veličiny $d = d(\bar{x})$. Pak dostáváme intervalovou proměnnou jako funkci

$$X(\bar{x}) = [\bar{x} - d(\bar{x}), \bar{x} + d(\bar{x})].$$

Účelem je pro *výsledek nepřímých měření* $y = f(x_1, ..., x_n)$ stanovit odpovídající interval neurčitosti (mezní chybu), cit. [15]:

$$Y = [y^-, y^+] = f(X_1, ..., X_n) = \{f(x_1, ..., x_n) \text{ pro } x_1 \in X_1, x_2 \in X_2, ... \}$$

Hodnoty y^-, y^+ jsou maximem a minimem výrazu

$$f(X_1, ..., X_n) = f(\bar{x}_1 + \Delta x_1, ..., \bar{x}_n + \Delta x_n) \text{ , kde } \Delta x_i = \mu_i - d_i \text{ ,}$$

kde μ_i je skutečná hodnota veličiny *x*. Na základě linearizace pomocí Taylorova rozvoje lze dospět ke vztahu

$$f(X_1, ..., X_n) = \bar{y} + \sum_{i=1}^{n} \frac{df}{dx_i}(\bar{x}_1, ..., \bar{x}_n)\, Dx_i \text{ ,}$$

a tedy

$$[y^-, y^+] = \bar{y} \pm d$$

$$\text{kde } \bar{y} = f(\bar{x}_1, ..., \bar{x}_n) \quad \text{a} \quad d = \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\delta f}{\delta x_i} (\bar{x}_1, ..., \bar{x}_n) \right| d_i \text{ .}$$

Tento algoritmus je sice zjednodušený, ale umožňuje práci s hraničními chybami *d*, které nemají pravděpodobnostní charakter. Zajímavé je, že pro případ lineární funkce *f(x)*, kdy jsou derivace $\frac{df}{dx_i} = 1$ je celková odchylka *d* součtem dílčích odchylek, což v pravděpodobnostní interpretaci znamená variantu lineárně korelovaných šumových složek.

1.4.4 Zaokrouhlování čísel

Zaokrouhlováním se nedopouštíme větší chyby než poloviny jednotky odpovídající řádu poslední ponechané číslice. *Relativní chyba zaokrouhleného čísla* je menší nebo rovna

$$s_{rel} \leq \frac{1}{2.A\ .\ 10^{n-1}} \text{ ,}$$

kde *A* je první platná číslice a *n* je počet platných číslic v zaokrouhleném čísle.