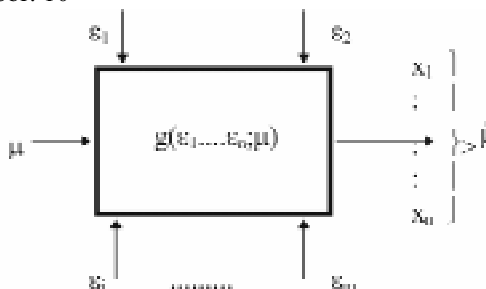


## 1.4 Nejistoty výsledků měření

V této kapitole je provedeno porovnání postupu pro určování nejistot a zaváděné terminologie společnosti EURACHEM s terminologií statistické analýzy. Zvolený přístup je silně závislý na předpokladech o vzniku a vlastnostech jednotlivých nejistot. *Nejistoty* v tomto pojetí představují ve statistické analýze vlastně *intervaly spolehlivosti*. Základní rozdíl je ve využití neexperimentálních informací o zdrojích variability.

### 1.4.1 Porovnání přístupů k výpočtu nejistot:

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



Obr. 10 Blokové schéma měřicího systému pro přímá měření

Zde  $\mu$  je měřená veličina,  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m$  jsou šumové složky (externí zdroje nejistot) a funkce  $g(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m, \mu)$  souvisí s modelem působení šumových složek (aditivní, multipikativní a kombinovaný).

#### 1. Analýza nejistot podle standardní statistické analýzy, cit. <sup>15, 16</sup>:

- Odhad veličiny  $\mu$  (bodový),
- Odhad rozptylu  $\sigma^2$  (bodový),
- Odhad intervalu spolehlivosti (IS) pro  $\mu$ ,
- Odhad vychýlení  $b = E(\mu - \hat{\mu})$ .

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

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

Jde o součet rozptylu  $D(\hat{\mu})$  a čtverce vychýlení  $b^2$ .

#### 2. Analýza nejistot podle EURACHEM, cit. <sup>11, 12</sup>:

- Odhad veličiny  $\mu$  (bodový): i když v literatuře EURACHEM není model speciálně

uveden, používá se zřejmě  $x_i = \mu + \sum_{i=1}^m \varepsilon_i$ , 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)  $\varepsilon_i$ . Jsou užívány následující míry rozptýlení:

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

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

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

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

Pro závislé zdroje nejistot se přičítají ještě kovariance.

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

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.<sup>14</sup> je navržen postup výpočtu nejistot pro případy, kdy vychýlení  $b$  eliminováno není. Jednoduše se vytvoří dvě rozšířené nejistoty

$$U_+ = U - b \text{ pro } U - b > 0, \text{ resp. } U_+ = 0$$

$$U_- = U + b \text{ pro } U + b > 0, \text{ resp. } U_- = 0.$$

To pak pochopitelně vede k nesymetrickému intervalu spolehlivosti.

## B. Nepřímá měření

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

### 1. Analýza nejistot podle standardní statistické analýzy, cit. <sup>15,16</sup>:

- Odhad*  $y$  z odhadů  $\hat{\mu}_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,
- Odhad rozptylu*  $D(\hat{y})$ ,
- Odhad intervalu spolehlivosti pro*  $y$ .

### 2. Analýza nejistot podle EURACHEM, cit. <sup>11,12</sup>:

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

$$\hat{y} = f(\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2, \dots, \hat{\mu}_m).$$

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

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

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

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

$D(y)$  se nesprávně označuje jako *zákon šíření nejistot*. V případě, že zdroje nejistot jsou lineárně závislé, provádí se korekce s využitím kovariancí  $cov(\dots)$ .

**Upozornění:** *Linearizace může 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 1.98 představuje *kvantil normovaného normálního rozdělení*. Pro nelineární transformaci však resultují nesymetrická rozdělení, což vede k nesymetrickému intervalu spolehlivosti. Ve speciálních případech (např. stopová analýza v analytické chemii) to může výrazně ovlivnit závěry: *pro pozitivně 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 doporučené společností EURACHEM odpovídají vlastně běžným pojmům, užívaným ve statistice:

**EURACHEM:**

*Standardní nejistota A*

*Standardní nejistota B*

*Kombinovaná nejistota*

*Rozšířená nejistota*

*Faktor pokrytí*

**Statistika:**

*směrodatná odchylka měřené šumové složky*

*směrodatná odchylka (odhadnutá) šumové složky*

*směrodatná odchylka funkce y*

*polovina intervalu spolehlivosti*

*kvantil normovaného normálního rozdělení*

**b) Poznámky statistické:** výpočty EURACHEM vycházejí z následujících 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  $n \rightarrow \infty$  je  $100(1 - \alpha)\%$  *interval spolehlivosti parametru*  $\mu$  roven výrazu

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

Při výpočtu pomocí 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.

#### Příklad 1.13 Výpočet nejistoty výsledku aritmetických operací přibližných čísel

Vypočítejte nejistotu výsledku  $y$  po provedení řady operací s přibližnými čísly:

$$y = \frac{4.10(\pm 0.02) \times 0.0050(\pm 0.0001)}{1.97(0.04)} = 0.0104 \pm 0.0003$$

$$y = \frac{(14.3(\pm 0.2) - 11.6(\pm 0.2)) \times 50.0(0.1)}{42.3(0.4)} = 3.2 \pm 0.3$$

### 1.4.3 Přístup intervalové analýzy k nejistotám

V praxi obvykle není známo rozdělení měřených veličin  $x$  resp. chyb měření  $\Delta$ , takže analýza nejistot založená na pravděpodobnostních předpokladech je tak 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*  $y = f(x_1, \dots, x_n)$  stanovit odpovídající interval neurčitosti (mezní chybu), cit. <sup>15</sup>:

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

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

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

kde  $\mu_i$  je skutečná hodnota veličiny  $x$ . Na základě linearizace pomocí Taylorova rozvoje lze dospět ke vztahu

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

a tedy

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

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

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.

#### **Příklad 1.14** Výpočet nejistoty teploty měřené rtuťovým teploměrem

Cílem je stanovit nejistotu měření teploty rtuťovým teploměrem dle specifikace *nejistot typu B*. Příklad ilustruje jednak různé možnosti výpočtu nejistot, jednak i zásadní fakt, že lze stanovit nejistotu bez znalosti konkrétního měření.

*Data:* zdroje nejistot typu B:  $x_1$  je chyba teploměru dle údajů výrobce [ $\pm 0.1$  °C],  $x_2$  je nejistota kalibrace dle údajů výrobce [ $\pm 1$  °C],  $x_3$  je nejistota odečtu teploty, odhad [ $\pm 0.25$  °C]

*Řešení:*

a) Předpoklad **rovnoměrného rozdělení** nejistot v daném intervalu

Nejistota pro zdroj  $x_1$  je  $\sigma_{x_1} = 0.5774 * 0.1 = 0.05774$ ,

Nejistota pro zdroj  $x_2$  je  $\sigma_{x_2} = 0.5774 * 1 = 0.5744$ ,

Nejistota pro zdroj  $x_3$  je  $\sigma_{x_3} = 0.14435$ ,

*Kombinovaná nejistota* (čili celková chyba) *pro nekorelované zdroje nejistot*

$$\sigma_c = \sqrt{\sigma_{x_1}^2 + \sigma_{x_2}^2 + \sigma_{x_3}^2} = 0.59796$$

*Rozšířená nejistota*  $U = 2 \sigma_c = 1.1958$

*Kombinovaná nejistota* (čili celková chyba) *pro korelované zdroje nejistot*

$$\sigma_c = \sigma_{x_1} + \sigma_{x_2} + \sigma_{x_3} = 0.77949$$

*Rozšířená nejistota*  $U = 2 \sigma_c = 1.5588$

b) Předpoklad **trojúhelníkového rozdělení** nejistot v daném intervalu

Nejistota pro zdroj  $x_1$  je  $\sigma_{x_1} = 0.2041 * 0.1 = 0.02041$ ,

Nejistota pro zdroj  $x_2$  je  $\sigma_{x_2} = 0.20410 * 1 = 0.20410$ ,

Nejistota pro zdroj  $x_3$  je  $\sigma_{x_3} = 0.05102$ ,

*Kombinovaná nejistota* (čili celková chyba) *pro nekorelované zdroje*  $\sigma_c = 0.21136$ ,

*Rozšířená nejistota*  $U = 2 \sigma_c = 0.42272$ ,

*Kombinovaná nejistota* (čili celková chyba) *pro korelované zdroje*  $\sigma_c = 0.2755$ ,

*Rozšířená nejistota*  $U = 2 \sigma_c = 0.5510$ .

c) Nepravděpodobnostní odhad nejistot (*intervalové proměnné*)

Celková odchylka  $d = 0.1 + 1.0 + 0.25 = 1.35$  a interval neurčitosti je roven

$$[y^-, y^+] = \bar{y} \pm d = \pm 1.35$$

*Závěr:* Volba rozdělení nejistot hraje zřejmě rozhodující roli ve výpočtu nejistot. Navíc je velmi pravděpodobné, že zdroje nejistot  $x_1$  a  $x_2$  budou mít spíše systematický než náhodný charakter.

#### 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

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

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

Např.  $10500 = 1.05 \times 10^4$  je  $A = 1.05$  a při zaokrouhlení na *dvě platná místa* je  $n = 2$  a hodnota 10500 má pak relativní chybu

$$s_{rel} \leq \frac{1}{2 \cdot 1 \cdot 10^{2-1}} (\times 100\%) = \frac{1}{20} (\times 100\%) = 5\%$$

zatímco při zaokrouhlení na *tři platná místa* je  $n = 3$  bude relativní chyba

$$s_{rel} \leq \frac{1}{2 \cdot 1 \cdot 10^{3-1}} (\times 100\%) = \frac{1}{200} (\times 100\%) = 0.5\%$$

U čísel, jejichž první platná číslice je 9 jsou relativní chyby při zaokrouhlení na *dvě platná místa* menší než 0.56%, na *tři platná místa* menší než 0.056% a na *čtyři platná místa* menší než 0.0056%.

#### 1.7 Doporučená literatura

- [1] Taylor J. R.: *An Introduction to Error Analysis*, University Science Books, Mill Valey, California 1982.
- [2] Lyon A. J.: *Dealing with Data*, Pergamon Press, London 1970.
- [3] Zelený F.: *Základní vlastnosti měřících přístrojů*, SNTL Praha 1976.
- [4] Novickij P. V., Zograf I. A.: *Oceňka pogrešnostej rezultatov izmerenij*. Atomizdat, Moskva 1985.
- [5] Hahn G. J., Nelson W.: *Technometrics* **12**, 95 (1970).
- [6] Mandel J.: *The Statistical Analysis of Experimental Data*, Interscience, New York 1964.
- [7] Manly B. F. J.: *Biom. J.* **28**, 949 (1986).
- [8] Müller J. W.: *Nucl. Instr. Meth.* **163**, 241 (1979).
- [9] Schwartz L. M.: *Anal. Chem.* **47**, 963 (1975).

- [10] Shapiro S. S., Gross A. J.: *Statistical Modelling Techniques*. Marcel Dekker Inc., New York 1981.
- [11] *Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement*, EURACHEM 1995
- [12] Taylor B., Kuyatt CH. E. : *Guidelines for Evaluation and Expressing the Uncertainty of NIST Measurement Results*, NIST Tech. Note 1297, 1994
- [13] Agostini D. G.: *Probability and Measurement Uncertainty in Physic*, Rept. DESY 95-242, Roma December 1995
- [14] Phillips S. D., Eberhart K. R., Parry B.: *Guidelines for Expressing the Uncertainty of Measurement Results Containing Uncorrected Bias*, J. Res. Natl. Inst. of Standards **102**, 577 (1997)
- [15] Meloun M., Militký J., Forina M.: *Chemometrics for Analytical Chemistry, Volume 1*, Ellis Horwood, Chichester, 1992.
- [16] Meloun M., Militký J.: *Statistické zpracování experimentálních dat*, Plus Praha 1994 (1. vydání), EAST PUBLISHING, Praha 1998 (2. vydání).
- [17] Elishakoff I.: *Convex Modeling - a Generalization of Interval Analysis for Nonprobabilistic Treatment of Uncertainty*, Proc. Int. Conf. APIC 95, El Paso, 1995 (a supplement to the international Journal of Reliable Computing).
- [18] Ratschek, H. : *SIAM J. Numer. Anal.* **17**, 656 (1980).