

Der ISO-GUM erhält Verstärkung

Der «Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement» (ISO-GUM bzw. GUM, [1]) ist die massgebende Referenz für die Bestimmung der Messunsicherheit. Eine Expertengruppe des Internationalen Büros für Mass und Gewicht (BIPM) in Paris widmet sich der Verbreitung und dem Unterhalt des ISO-GUM und arbeitet an einer Reihe von Ergänzungsdokumenten. GUM-Supplement 1, vor kurzem veröffentlicht, befasst sich mit der numerischen Fortpflanzung von Verteilungen mittels Monte-Carlo-Methode [2]. GUM-Supplement 2, das sich im fortgeschrittenen Entwicklungsstadium befindet, widmet sich der Behandlung mehrdimensionaler Messgrössen [3]. In diesem Beitrag werden beide Themen näher erläutert.

MARKUS ZEIER

Bereits in den frühen Siebzigerjahren des letzten Jahrhunderts erkannte das Internationale Komitee für Mass und Gewicht (CIPM), dass eine einheitliche Methode bei der Bewertung der Messunsicherheit fehlte. Es dauerte dann allerdings bis 1986, bis eine Arbeitsgruppe der ISO ihre Tätigkeit an einem entsprechenden Dokument aufnahm. Sieben Jahre später hatte der ISO-GUM seine Geburtsstunde. Die revidierte Fassung aus dem Jahre 1995 [1] ist heute noch verbindlich, und der dadurch definierte Standard (Kasten 1) wird durch eine stattliche Anzahl internationaler Organisationen getragen. Der ISO-GUM bildet die Grundlage für die Bestimmung der Messunsicherheit nach metrologischen Grundsätzen.

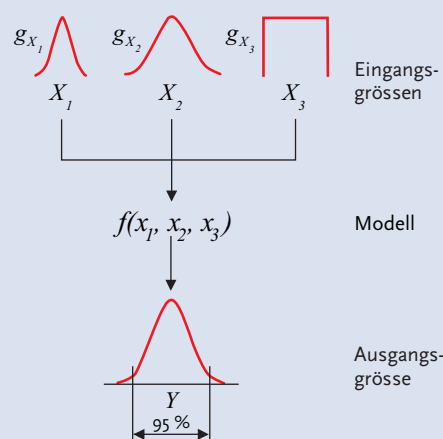
Ergänzungsdokumente zum ISO-GUM

1997 wurde am BIPM das Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM) gebildet. Eine der Arbeitsgruppen des JCGM übernahm den ISO-GUM und kümmerte sich fortan um Unterhalt, Verbreitung und Weiterentwicklung des Dokuments. Dabei wurde eine Reihe von Ergänzungsdokumenten in die Planung aufgenommen. Zwei dieser Dokumente sind als Einführung in den ISO-GUM und zur Beschreibung der statistischen Prinzipien und Grundlagen gedacht und nehmen damit eine eher unterstützende Funktion ein. Die weiteren fünf Dokumente, drei davon als so genannte GUM-Supplemente, beschäftigen sich mit spezifischen Themen, die im ISO-GUM nicht, oder nur sehr eingeschränkt, behandelt werden:

- Supplement 1 (GUM-S1): Numerische Fortpflanzung der Messunsicherheit mittels Monte-Carlo-Methode;
- Supplement 2 (GUM-S2): Mehrdimensionale Messgrössen;
- Supplement 3: Modellierung;
- Zwei weitere Dokumente über Konformitätsbewertung und die Anwendung der «Least-Squares»-Methode.

GUM-S1 [2] wurde nach einem aufwändigen Reviewprozess vor kurzem veröffentlicht. GUM-S2 [3] befindet sich in einem fortgeschrittenen Stadium der Entwicklung, wird aber wohl kaum vor 2010 erscheinen. Beide Dokumente beschäftigen

Modellierung des Messvorgangs nach ISO-GUM



Zentrales Element der Methode ISO-GUM ist die Modellierung des Messvorgangs. Das Messmodell $f(x_1, x_2, \dots)$ verknüpft mehrere Eingangsgrössen x_i mit einer Ausgangsgrösse y . Die Kenntnis über die Eingangsgrössen wird durch Wahrscheinlichkeits-Dichteverteilungen g_x repräsentiert. Dabei wird die Standardabweichung einer Verteilung als Messunsicherheit $u(x_i)$ interpretiert. Die Verteilung einer Eingangsgrösse kann entweder durch statistische Analyse einer Messreihe (Typ A) oder durch Erfahrung, Spezifikationen, frühere Messungen usw. (Typ B) bestimmt werden. Zur Bestimmung der Unsicherheit der Ausgangsgrösse $u(y)$ werden die Varianzen der Eingangsverteilungen durch ein linearisiertes Modell hindurch fortgepflanzt. Dadurch ergibt sich die bekannte Gleichung für die Standardunsicherheit der Ausgangsgrösse:

$$u^2(y) = \sum_i c_i^2 u^2(x_i); \quad c_i = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

c_i bezeichnet man als Sensitivitätskoeffizienten, die als partielle Ableitung der Modellfunktion nach den Eingangsgrössen berechnet werden. Zur Bestimmung der erweiter-

ten Messunsicherheit $U(y) = k \cdot u(y)$, das heisst eines Intervalls mit einem bestimmten Bedeckungsgrad, wird für die Form der Ausgangsgrösse die Annahme gemacht, dass sie normalverteilt ist. Für einen Bedeckungsgrad von 95 % erhält man dabei einen Erweiterungsfaktor k von 1.96.

Die vorangehende Betrachtung ist etwas vereinfacht. Die Methodik des ISO-GUM erlaubt aber auch die Berücksichtigung von Korrelationen zwischen Eingangsgrössen und die Behandlung statischer Unsicherheiten bei kleinen Stichproben in der Typ-A-Analyse unter Einbezug des Begriffs der Freiheitsgrade.

Entscheidend ist aber vor allem, dass dieser wahrscheinlichkeitsbasierte Ansatz eine einheitliche Behandlung systematischer und statistischer Effekte ermöglicht. Auf diese Art ermittelte Messresultate und deren Unsicherheiten sind somit nachvollziehbar, vergleichbar und weiter verwendbar.

1 Bestimmung der Messunsicherheit nach ISO-GUM.

sich mit Techniken, die für die moderne Messunsicherheitsberechnung von Bedeutung sind und die im Folgenden näher erläutert werden.

Die Grenzen der Linearität

Der ISO-GUM verwendet bei der Fortpflanzung der Messunsicherheit durch das Modell hindurch eine Näherungsmethode (Kasten 1), die auf der Linearisierung des Modells beruht. Die Diagramme 2 zeigen zwei Situationen, in denen diese Näherung versagt. Im einen Fall wird die genäherte Unsicherheit der Ausgangsgrösse durch die Nichtlinearität des Modells verfälscht. Entscheidend dabei ist nicht die Nichtlinearität des Modells allein, sondern die Kombination mit der Messunsicherheit der Eingangsgrösse. Erst ab einer gewissen Grösse der Messunsicherheit beginnt sich die Nichtlinearität überhaupt auszuwirken.

Im anderen Fall fällt der Messpunkt auf einen Extremwert des Modells. Die Näherung liefert hier – unabhängig vom Unsicherheitsintervall der Eingangsgrösse –, immer null für die Unsicherheit der Ausgangsgrösse, da die Ableitung und damit der Sensitivitätskoeffizient im Extremwert der Funktion verschwinden.

Im Weiteren beruht die Näherung darauf, nur die Varianzen der Eingangsverteilungen fortzupflanzen. Damit geht die Information über die Form der Verteilungen verloren und entsprechend hat man auch keine Kenntnis über die Verteilung der Ausgangsgrösse. Zwar lässt sich die Ausgangsverteilung aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes oder des Prinzips der maximalen Entropie – je nachdem, welcher statistischen «Glaubensrichtung» man angehört – als gaussförmig annähern, aber auch hier kann die Nichtlinearität oder die Dominanz einer nicht-normalen Eingangsverteilung zu signifikanten Abweichungen von der Gaussform führen. Bei der Bestimmung der erweiterten Messunsicherheit kann dies erhebliche Fehler verursachen.

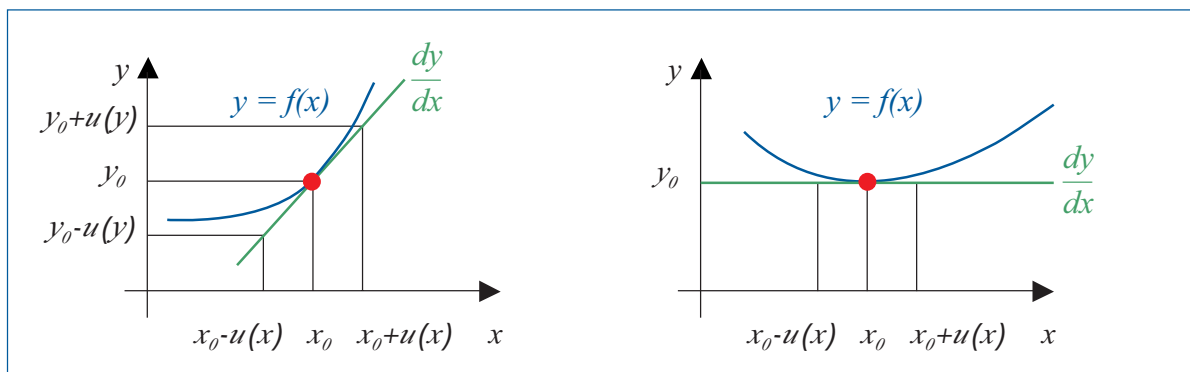
Fortpflanzung von Verteilungen mittels Zufallszahlen

Die oben erwähnten Probleme liessen sich vermeiden, wenn man auf die Näherung verzichtete und die Verteilungen der Eingangsgrössen direkt durch das Modell hindurch fortpflanzte. Da es sich hier aber um Verteilungen handelt, ist die Sache etwas komplizierter. Mathematisch lässt sich diese Fortpflanzung durch die Markov-Gleichung ausdrücken:

$$g_y(\eta) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} g_{x_1, \dots, x_N}(\xi_1, \dots, \xi_N) \cdot \delta(\eta - f(\xi_1, \dots, \xi_N)) d\xi_1 \dots d\xi_N$$

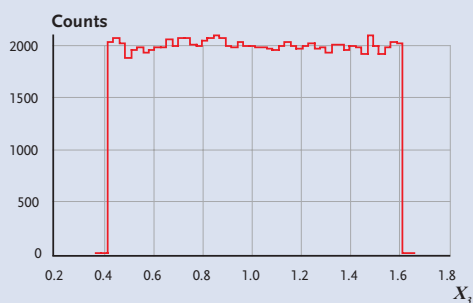
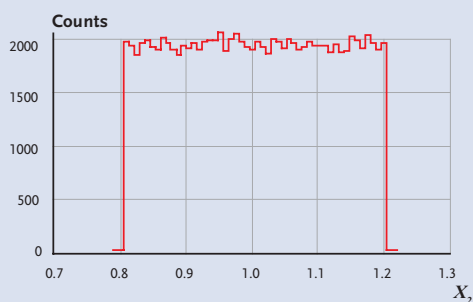
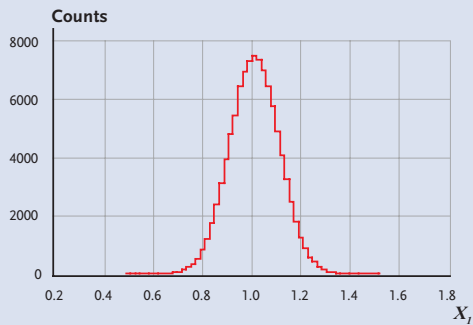
Dabei bezeichnet g_{x_1, \dots, x_N} die kombinierte Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Eingangsgrössen, g_y die resultierende Verteilung der Ausgangsgrösse, δ die Delta-Funktion und f das Messmodell.

Leider lässt sich dieses Integral nur in wenigen Spezialfällen analytisch lösen und man muss auf numerische Methoden zurückgreifen. Dabei bietet sich insbesondere das Monte-Carlo-Verfahren an, das in GUM-S1 propagiert wird.



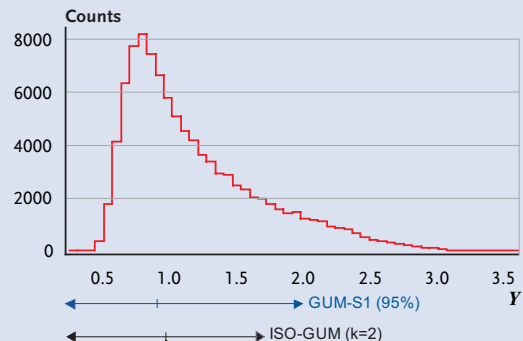
2 Die lineare Unsicherheitsfortpflanzung als Standardmethode des GUM liefert in gewissen Situationen unbefriedigende Resultate.

Fortpflanzung von Verteilungen



$$\frac{x_1 x_2}{x_3} \rightarrow y$$

Als einfaches Beispiel wird das Messmodell $y = \frac{x_1 x_2}{x_3}$ betrachtet. Die Eingangsgrößen seien folgendermassen charakterisiert: $x_1 = 1.00$, $u(x_1) = 0.10$ (Gaussverteilung), $x_2 = 1.00$, $u(x_2) = 0.12$, (Rechteckverteilung), $x_3 = 1.00$, $u(x_3) = 0.35$ (Rechteckverteilung). Die Histogramme wurden mit 100 000 Iterationen erzeugt. Die Verteilung der Ausgangsgrösse (Diagramm rechts) ist asymmetrisch. Eingezeichnet sind Mittelwert und ein Intervall mit 95 % Bedeckungsgrad, das man durch Analyse der Ausgangsverteilung gemäss GUM-S1 erhält. Im Vergleich dazu das erweiterte Unsicherheitsintervall ($k = 2$), das man mittels linearer Unsicherheitsfortpflanzung gemäss ISO-GUM erhält.



3 Beispiel für die Anwendung der Monte-Carlo-Methode.

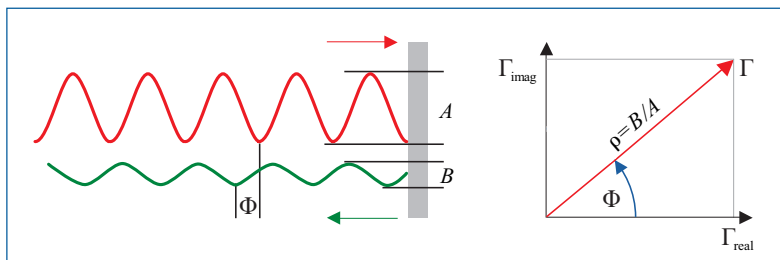
Monte Carlo hat als Simulationsverfahren eine Tradition in so unterschiedlichen Gebieten wie Teilchen- und Kernphysik oder Portfolio-Management. Es handelt sich um eine stochastische Methode, die auf der Durchführung einer grossen Anzahl von Zufallsexperimenten beruht mit nachfolgender statistischer Auswertung der Resultate.

Monte Carlo bietet eine numerische Lösung für Probleme, die analytisch nicht oder nur sehr aufwändig lösbar sind. Die Monte-Carlo-Methode kann sowohl für rein mathematische Probleme wie die Bestimmung hochdimensionaler Integrale als auch für die Simulation komplexer Prozessabläufe eingesetzt werden. Für die effiziente Anwendung eines Monte-Carlo-Verfahrens werden ein Computer und Software benötigt. Zentrales Element ist dabei die Erzeugung von Zufallszahlen, daher auch der namentliche Bezug aufs Glücksspiel.

Für die Messunsicherheitsberechnung lässt sich Monte Carlo auf sehr intuitive Weise einsetzen, indem man den Messvorgang quasi auf virtuelle Art sehr oft wiederholt. Die Werte der Eingangsgrößen werden dabei entsprechend ihrer Wahrscheinlichkeits-Dichteverteilungen variiert. Dies geschieht über die oben erwähnten Zufallszahlen. Für jede Wiederholung wird aus einem Set von Eingangswerten der Wert der Ausgangsgrösse berechnet. Dadurch wird allmählich eine Verteilung für die Ausgangsgrösse erzeugt. Diese Verteilung lässt sich direkt statistisch auswerten. Dies wird in Kasten 3 anhand eines Beispiels dargestellt.

Statistische Analyse der Ausgangsverteilung

Aus der Verteilung der Ausgangsgrösse lassen sich, wie in Kasten 3 beispielhaft dargestellt, ein Wert für die Ausgangsgrösse und ein Unsicherheitsintervall mit einem bestimmten Bedeckungsgrad, typischerweise 95 %, bestimmen.



4 Die Reflexion eines elektrischen Signals an einem Impedanzsprung wird durch ein Amplitudenverhältnis und einen Phasensprung charakterisiert. Diese zweidimensionale Größe kann entweder in Polarkoordinaten oder in komplexen Koordinaten dargestellt werden.

Dazu wird mittels statistischer Auswertung der Mittelwert der Verteilung bestimmt und ein Intervall gewählt, das 95 % der Fläche der Verteilung enthält.

Bei einer unimodalen, symmetrischen Verteilung fällt der Mittelwert gerade mit dem Maximum zusammen und das Unsicherheitsintervall ist symmetrisch bezüglich des Werts der Ausgangsgröße. Im Allgemeinen kann die Verteilung jedoch auch asymmetrisch sein und die Bestimmung des Unsicherheitsintervalls ist nicht mehr eindeutig. GUM-S1 empfiehlt in diesem Fall, das kürzeste Intervall zu bestimmen, und erläutert die Rechenvorschrift dazu.

Das so bestimmte Unsicherheitsintervall ist nicht exakt, sondern unterliegt statistischen Schwankungen, die von der Anzahl Iterationen abhängen. GUM-S1 beschreibt ein adaptives Verfahren, das – abhängig von der gewünschten Genauigkeit – die benötigte Anzahl Iterationen automatisch einstellt.

Technische Aspekte der Monte-Carlo-Methode

Bei dieser Vorgehensweise spielt die Erzeugung von Zufallszahlen eine wichtige Rolle. Da der Computer nicht in der Lage ist, echte Zufallszahlen zu erzeugen, benötigt man dazu eine Vorschrift, welche die Zufälligkeit möglichst gut simuliert. Ausgehend von einer Startzahl, genannt Seed, wird bei wiederholter Anwendung dieser Vorschrift eine Zahlenreihe erzeugt, deren Elemente möglichst gleichförmig im Intervall zwischen 0 und 1 liegen.

Bei der Übersetzung dieser Vorschrift in Software spricht man von einem Generator, der Pseudo-Zufallszahlen erzeugt. Solche Generatoren sind heutzutage Teil jedes Betriebssystemes und auch vieler Programmpakete. Es existieren verschiedene Algorithmen, die sich in der statistischen Qualität (Periodizität, statistische Gleichförmigkeit in höheren Dimensionen) unterscheiden. In GUM-S1 werden namentlich Algorithmen aufgeführt, die den Anforderungen genügen und zur Benutzung empfohlen werden. Der Benutzer muss sich mit dieser Thematik nicht weiter beschäftigen, solange er sich an die Empfehlung hält.

Für die Eingangsgrößen benötigt man jedoch Verteilungen unterschiedlicher Position, Breite und Form. Glücklicherweise existieren etablierte mathematische Methoden, mit denen sich aus den gleichförmig verteilten Werten, die der Zufallszahlen-Generator erzeugt, sämtliche Verteilungen herstellen

lassen, die für die Unsicherheitsberechnung von Bedeutung sind. GUM-S1 macht detaillierte Angaben zu den relevanten Rechenvorschriften, es gibt aber auch Programm Bibliotheken, in denen diese Methoden bereits implementiert sind.

Ähnlich verhält es sich mit der Problematik korrelierter Eingangsgrößen. Es gibt eine Methode zur Erzeugung korrelierter, gaussverteilter Größen, die auf der Cholesky-Zerlegung der Kovarianzmatrix beruht, die den Grad der Korrelation bestimmt. Auch diese Vorschrift wird im GUM-S1 detailliert erläutert. Die Erzeugung beliebiger Kombinationen von Randverteilungen mit gewünschtem Korrelationsgrad hingegen ist ein kompliziertes Problem, das Gegenstand aktueller Forschung ist. Man kann aber davon ausgehen, dass in der Messunsicherheitsberechnung eine solche Situation kaum zur Anwendung gelangt.

Zum Schluss sei noch auf ein Softwarepaket verwiesen, das unter der Bezeichnung Measurement Uncertainty Simulation and Evaluation (MUSE [4]) an der ETH Zürich entwickelt wird. Im Rahmen einer Doktorarbeit wird ein Messunsicherheitsrechner entwickelt, der die Monte-Carlo-Methode anwendet und sich nach den Empfehlungen von GUM-S1 richtet. Die entsprechende Software wird auf der Webseite des Projektteams gratis zur Verfügung gestellt.

Mehrdimensionale Messgrößen

Mehrdimensionale Messgrößen sind in vielen Gebieten der Metrologie von Bedeutung. In der elektrischen Hochfrequenz beispielsweise werden Phänomene oft mittels Begriffen aus der Wellenmechanik beschrieben. Illustration 4 zeigt die Reflexion eines elektrischen Signals an einem Impedanzsprung. Die Reflexion wird durch den Anteil der Amplitude, der reflektiert wird, sowie die relative Phasenlage des reflektierten Signals beschrieben. Die Reflexion ist damit eine zweidimensionale Messgröße, die entweder in Polarkoordinaten (mit Amplitude und Phase) oder in komplexen Koordinaten (mit Real- und Imaginärteil) dargestellt werden kann.

Eng verbunden mit der Messunsicherheitsberechnung mehrdimensionaler Messgrößen ist der Begriff der Korrelation. Sobald Korrelation im Spiel ist, drängt sich eine mehrdimensionale Behandlung auf. Davon sind nicht allein physikalische Vektorgrößen – wie das bereits erwähnte Beispiel aus der Hochfrequenz – betroffen, sondern auch skalare Größen, die korreliert sind.

Im ISO-GUM wird zwar die Korrelation von Eingangsgrößen relativ ausführlich behandelt, mehrdimensionale Ausgangsgrößen werden jedoch nur am Rand erwähnt. Dem versucht GUM-S2 Abhilfe zu schaffen, indem – insbesondere auf der formalen Ebene – neue Konzepte eingeführt werden, die auf den Begriffen der multivariaten Statistik beruhen. GUM-S2 hält sich dabei an die Prinzipien des ISO-GUM und kann als Erweiterung der dort propagierten Methoden verstanden werden.

GUM-S2 ist zwar noch nicht veröffentlicht worden, doch werden entsprechende Erweiterungen in der Literatur [5-7] bereits seit einigen Jahren diskutiert, so dass – zumindest in groben Zügen – der Inhalt bekannt sein dürfte. Eine entscheidende Bedeutung kommt dabei der Verwendung des Vektor- und Matrizenformalismus zu. In Kasten 5 werden die formalen Grundzüge der mehrdimensionalen Behandlung der Messunsicherheit erläutert.

Auch in der mehrdimensionalen Behandlung gibt es eine Typ-A-Analyse, basierend auf der multivariaten Häufigkeitsstatistik, indem aus einer Serie von Werten eines Messvektors ein Mittelwertsvektor und eine Kovarianzmatrix, die dann als Typ-A-Unsicherheitsmatrix auftritt, gebildet werden. Darauf kann hier aus Platzgründen nicht weiter eingegangen werden.

Offene Fragen

Eine gewisse Problematik stellt der Begriff der Freiheitsgrade dar. Der ISO-GUM benutzt Freiheitsgrade und wendet die Welch-Satterthwaite-Gleichung an, um die beschränkte statistische Genauigkeit kleiner Stichproben in der Typ-A-Analyse zu berücksichtigen. Zwar existieren Vorschläge, um diese Begriffe auch auf den mehrdimensionalen Fall zu erweitern [7], jedoch dürfte zum jetzigen Zeitpunkt noch offen sein, in welcher Art und ob überhaupt diese Methode in GUM-S2 einfließen wird, zumal das Konzept der Freiheitsgrade in der Messunsicherheitsberechnung nicht unumstritten ist [8]. Es ist nicht ausgeschlossen, dass sogar der ISO-GUM überarbeitet und dabei das Konzept der Freiheitsgrade gänzlich fallen gelassen wird. Offiziell angekündigt ist dieses Vorhaben jedoch noch nicht.

Die im ersten Teil dieses Beitrags diskutierte Monte-Carlo-Methode lässt sich auch auf den mehrdimensionalen Fall anwenden. Die Möglichkeit zur Erzeugung korrelierter, gaussverteilter Eingangsverteilungen wurde bereits erwähnt und ist in GUM-S1 beschrieben. Unklar ist jedoch die Behandlung mehrdimensionaler Ausgangsverteilungen, die mittels Monte Carlo erzeugt wurden und eine deutliche Abweichung von der Gaussform zeigen.

Zwar ist es durchaus denkbar, eine Vorschrift zu definieren, die beispielsweise verlangt, dass mittels numerischer Optimierung das kleinstmögliche Gebiet bei gegebenem Bedeckungsgrad bestimmt wird. Es dürfte jedoch schwierig sein,

ein solchermaßen bestimmtes Bedeckungsgebiet in kompakter Art und Weise – beispielsweise in einem Zertifikat –, zu charakterisieren. Hier wird der GUM-S2 kaum umhin kommen, eine Kompromisslösung vorzuschlagen.

Der ISO-GUM erhält Verstärkung

Die Monte-Carlo-Methode, die im GUM-Supplement S1 [2] vorgestellt wird, vermeidet die Problematik der linearen Unsicherheitsfortpflanzung (Nichtlinearität der Modellgleichung und Nichtnormalität der Ausgangsverteilung), indem Verteilungen numerisch fortgepflanzt werden. Es stellt sich die Frage, ob nicht generell alle Messunsicherheitsberechnungen nur noch unter Verwendung von Monte Carlo durchgeführt werden sollen.

Zu beachten ist allerdings, dass Monte Carlo im Allgemeinen aufwändiger in der Anwendung ist und nur mittels Computer durchgeführt werden kann. Ausserdem ist die lineare Unsicherheitsfortpflanzung in vielen Fällen völlig genügend. Auch ist es beispielsweise umständlicher, in Monte Carlo einzelne Unsicherheitsbeiträge zu spezifizieren, etwas, das sich in der linearen Unsicherheitsfortpflanzung über die Sensitivitätskoeffizienten sehr einfach bewerkstelligen lässt. Deshalb empfiehlt sich, die Monte-Carlo-Methode nur in begründeten Fällen anzuwenden und sonst in erster Linie zu Validierungszwecken zu benutzen.

Die mehrdimensionale Behandlung von Messunsicherheiten beruht vor allem auf einer formalen Erweiterung der Prinzipien des ISO-GUM. Zwar ist GUM-S2 [3] noch nicht veröffentlicht, doch sind die Grundzüge aufgrund der vorhandenen Literatur im Wesentlichen ersichtlich, wenn es auch noch ein paar offene Fragen gibt. Zu beachten ist, dass die mehrdimensionale Behandlung auch schon bei einfachen Messmodellen sehr schnell aufwändig wird und von Hand kaum mehr zu bewältigen ist. Jedoch bietet gerade der Vektor- und Matrizenformalismus eine formale Klarheit, die sich besonders gut zur Implementierung in Software eignet.

Referenzen

- [1] BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML, Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement, International Organisation for Standardization (ISO), 1995.
- [2] BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML, Supplement 1 to the Guide to the expression of uncertainty in measurement – Propagation of distributions using a Monte Carlo method, JCGM 101, 2008, abrufbar unter www.bipm.org/en/publications/guides/gum
- [3] BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP and OIML, Supplement 2 to the Guide to the expression of uncertainty in measurement – Models with any numbers of output quantities, in Vorbereitung.
- [4] Measurement Uncertainty Research Group, ETH Zurich, www.mu.ethz.ch
- [5] DIN 1319-4, Grundlagen der Messtechnik, Teil 4: Auswertung von Messungen, Messunsicherheit, 1999.

Vektor- und Matrizenformalismus

Bei der multivariaten Behandlung werden die Messgrößen durch Spaltenvektoren $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ (Superskript T steht für die Transposition) erfasst und deren Messunsicherheiten durch Matrizen

$$\mathbf{u}_x = \begin{pmatrix} u(x_1, x_1) & u(x_1, x_2) & \dots & u(x_1, x_n) \\ u(x_2, x_1) & u(x_2, x_2) & \dots & u(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u(x_n, x_1) & u(x_n, x_2) & \dots & u(x_n, x_n) \end{pmatrix}$$

Die Elemente der Unsicherheitsmatrix lassen sich folgendermassen darstellen:

$u = u(x_i, x_j) = u(x_i) u(x_j) r(x_i, x_j)$
 $r(x_i, x_j)$ bezeichnet dabei den Korrelationskoeffizienten zwischen den beiden Elementen x_i und x_j . Auf der Diagonalen der Matrix befinden sich somit die Quadrate der Standardunsicherheiten der einzelnen Elemente von \mathbf{x} und abseits davon die Information über die Korrelation. In Anlehnung an die Statistik wird die Unsicherheitsmatrix auch oft Kovarianzmatrix bezeichnet. Unsicherheitsmatrizen sind immer symmetrisch und positiv definit.

Basierend auf diesen Grundlagen, lässt sich jetzt ein allgemeines, mehrdimensionales Messmodell definieren:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad \begin{cases} y_1 = f_1(x_1, \dots, x_n) \\ \vdots \\ y_m = f_m(x_1, \dots, x_n) \end{cases}$$

Dabei werden n Eingangsgrößen auf m Ausgangsgrößen abgebildet. Die Unsicherheit des Eingangsvektors sei durch eine Unsicherheitsmatrix \mathbf{u}_x charakterisiert und ferner sei die Matrix der Sensitivitätskoeffizienten $\mathbf{J}_{f,x}$, die auch als Jacobi-Matrix bezeichnet wird, bekannt.

$$\mathbf{J}_{f,x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Die Unsicherheitsmatrix des Ausgangsvektors \mathbf{u}_y lässt sich dann mittels linearer Unsicherheitsfortpflanzung als einfache Matrizenmultiplikation berechnen:

$$\mathbf{u}_y = \mathbf{J}_{f,x} \cdot \mathbf{u}_x \cdot \mathbf{J}_{f,x}^T \quad (1.1)$$

Gleichung (1.1) ist die Verallgemeinerung des linearen Fortpflanzungsgesetzes, das im ISO-GUM behandelt wird. Bei der Reduktion auf eine Ausgangsgrösse und ohne Korrelation der Eingangsgrößen erhält man den einfachen skalaren Fall, bei dem sich die Unsicherheits-

beiträge der Eingangsgrößen im Quadrat addieren (wie in Kasten 1 dargestellt).

Analog zum skalaren Fall verliert man durch die Näherung bei der Fortpflanzung die Information über die Form der Ausgangsverteilung. Auch hier nimmt man eine gaussförmige Verteilung an, nur handelt es sich jetzt um eine mehrdimensionale Gaussverteilung \mathbf{g}_y , die durch den Resultatsvektor \mathbf{y}_0 und die Unsicherheitsmatrix \mathbf{u}_y charakterisiert wird.

$$\mathbf{g}_y = \frac{1}{(2\pi)^{m/2} |\mathbf{u}_y|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \mathbf{u}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)^T \right] \quad (1.2)$$

Diese Gleichung bildet den Ausgangspunkt der Bestimmung der erweiterten Unsicherheit. Dabei geht es darum, ein m -dimensionales Gebiet zu bestimmen, das sämtliche Komponenten des Ausgangsvektors simultan mit einer gewissen Bedeckungswahrscheinlichkeit enthält. Eine sinnvolle Wahl für die Form dieses Gebietes besteht darin, Grenzen konstanter Wahrscheinlichkeitsdichte der Verteilung zu wählen. Anhand von (1.2) erkennt man, dass Werte, für die \mathbf{g}_y konstant ist, gegeben sind durch

$$(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) \mathbf{u}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)^T = \text{konst} \quad (1.3)$$

Diese Gleichung beschreibt ein m -dimensionales Ellipsoid. Im zweidimensionalen Fall entspricht dies einer Ellipse, deren Ausrichtung durch \mathbf{u}_y bestimmt wird. Im Grenzfall mit identischen Unsicherheiten in allen Komponenten und in Abwesenheit von Korrelation erhält man ein kreisförmiges Gebiet. Korrelation führt dazu, dass die Ellipse geneigt erscheint. Die Konstante in Gleichung (1.3) bestimmt die Grösse des elliptischen Gebiets. Aus der multivariaten Statistik ist bekannt, dass man in diesem Fall für einen gewünschten Bedeckungsgrad α und eine vorgegebene Dimensionalität m das α -Quantil der Chi-Quadrat-Verteilung mit m Freiheitsgraden, $\chi_{m,\alpha}^2$, wählen muss. Dabei handelt es sich um eine häufig benutzte Grösse in der Statistik, die sich in Tabellen nachschlagen lässt. Beispielsweise erhält man für $m = 2$ und $\alpha = 0.95$ $\chi_{2,0.95}^2 = (2.45)^2$. Im Grenzfall für $m = 1$ erhält man den bekannten Erweiterungsfaktor des skalaren Falls $\chi_{1,0.95}^2 = (1.96)^2$.

5 Mehrdimensionale Behandlung der Messunsicherheit.

Referenzen (Fortsetzung)

- [6] N. M. Ridler, M. J. Salter, An approach to the treatment of uncertainty in complex S-parameter measurements, metrologia 39, pp. 295–302, 2002.
- [7] R. Willink, B. D. Hall, A classical method for uncertainty analysis with multidimensional data, metrologia 39, pp. 361–369, 2002.
- [8] R. N. Kacker, Bayesian Alternative to the ISO-GUM's use of the Welch-Satterthwaite formula, metrologia 43, pp. 1–11, 2006.



Dr. Markus Zeier, Stv. Sektionschef Elektrizität, Leiter des Labors
Hochfrequenz, Direktwahl +41 31 32 33 491, markus.zeier@metas.ch.

L'ISO-GUM est renforcée

La méthode Monte-Carlo, qui est présentée dans le Supplément 1 [2] du GUM, évite la problématique de la propagation linéaire des incertitudes (non linéarité de la modélisation et non normalité de la distribution de départ), avec une propagation des distributions qui se fait par simulation numérique. Il se pose la question : ne faudrait-il pas appliquer de manière générale la méthode Monte-Carlo pour tous les calculs d'incertitudes de mesure ?

Il faut toujours tenir compte du fait que la méthode Monte Carlo est généralement plus compliquée et qu'une simulation Monte Carlo se fait sur ordinateur. En outre, la propagation linéaire des incertitudes est tout à fait suffisante la plupart du temps. Avec la méthode Monte Carlo, il est plus difficile de spécifier certaines contributions d'incertitude, ce qui est très facile dans la propagation linéaire avec les coefficients de sensibilité. La méthode Monte-Carlo ne se justifie donc que dans des cas spécifiques particuliers ou en tant que validation des procédures.

Le traitement multidimensionnel des incertitudes de mesure repose avant tout sur une extension formelle des principes de l'ISO-GUM. Le Supplément 2 [3] du GUM n'est pas encore publié mais ses bases figurent pour l'essentiel dans les ouvrages de référence disponibles, quand bien même il reste encore quelques questions ouvertes. Il convient de relever que le traitement multidimensionnel peut très vite devenir exigeant et compliqué, même pour des modèles de mesure simples et ne se fait plus guère manuellement. Néanmoins, le formalisme vectoriel et matriciel procure une clarté qui convient particulièrement bien pour la mise en œuvre d'un logiciel.

L'ISO-GUM viene rafforzato

Propagando numericamente le distribuzioni, il metodo Monte Carlo, presentato nel GUM-Supplement S1 [2], evita la problematica della propagazione lineare dell'incertezza (non linearità dell'equazione del modello e non normalità della distribuzione iniziale). C'è da chiedersi se tutti i calcoli delle incertezze di misurazione non dovrebbero essere eseguiti in maniera generale solo con il metodo Monte Carlo.

Generalmente, l'applicazione del metodo Monte Carlo è più complessa e può essere effettuata soltanto mediante computer. Inoltre in molti casi la propagazione lineare dell'incertezza è del tutto sufficiente. Ad esempio nel metodo Monte Carlo è pure più difficoltoso specificare i singoli contributi all'incertezza, cosa che invece nella propagazione lineare dell'incertezza può essere eseguita molto facilmente mediante i coefficienti di sensibilità. Si consiglia pertanto di applicare il metodo Monte Carlo soltanto in casi motivati e altrimenti di utilizzarlo anzitutto a fini di convalida.

Il trattamento multidimensionale di incertezze di misurazione è basato soprattutto su un'estensione formale dei principi dell'ISO-GUM. È vero che il GUM-S2 [3] non è ancora stato pubblicato, i tratti fondamentali sono però essenzialmente chiari in virtù della bibliografia disponibile, sebbene vi siano ancora un paio di domande in sospeso. Il trattamento multidimensionale diventa già molto rapidamente complesso anche in caso di modelli di misurazione semplici e non può praticamente più essere portato a termine senza l'aiuto di computer. Tuttavia proprio il formalismo vettoriale e matriciale offre una chiarezza formale, che si presta particolarmente bene ad essere implementata in un software.

The ISO-GUM gets a boost

The Monte Carlo Method, introduced in GUM Supplement S1 [2], avoids the problem of linear uncertainty propagation (non-linearity of the model equation and non-normality of the output distribution), in that distributions are numerically propagated. This poses the question as to whether all measurement uncertainty calculations should only be carried out using the Monte Carlo method as a general principle.

The Monte Carlo method is generally more time-consuming in use and can only be carried out on a computer. Apart from that, linear uncertainty propagation is perfectly adequate in a great number of cases. Moreover, specifying individual uncertainty contributions, for example, is a more laborious procedure in the Monte Carlo method. This is a task that can be accomplished very easily in the linear uncertainty propagation through the sensitivity coefficients. It is therefore advisable only to use the Monte Carlo method in justified cases and otherwise use it primarily for validation purposes.

The multidimensional treatment of measurement uncertainties is based first and foremost on a formal expansion of the principles contained in ISO-GUM. Although GUM-S2 [3] is yet to be published, the main features are largely clear from the available literature, even though a number of issues are yet to be resolved. It should be born in mind that the multidimensional treatment can rapidly become extremely time-consuming and barely capable of being dealt with manually, even for simple measurement models. Nevertheless, vector and matrix formalism in particular offer a formal clarity that lends itself particularly well to software implementation.