



Univerzita Palackého
v Olomouci

Zákon šíření nejistot

Chemometrie I (ACH/CHEX1)

(c) David MILDE, 2023



Univerzita Palackého
v Olomouci

Zákon šíření (propagace) nejistot

- Často je třeba zjistit nejistotu výsledku (ve formě směrodatné odchylky s) získaného výpočtem z několika měření, která jsou sama o sobě zatížena určitými nejistotami. Pro konečný výsledek R , plynoucí z měření $A, B, \dots$, zatížených nejistotami platí, že pro $R = f(A, B, \dots)$ je nejistota:

$$s_R^2 = \left(\frac{\partial R}{\partial A}\right)^2 s(A)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial B}\right)^2 s(B)^2 + \dots$$

- Uvedený výpočet nejistot předpokládá, že nejistoty nezávisle proměnných se sčítají a ani částečně se vzájemně nekompensují. To je velmi nepravděpodobné a takový odhad nejistoty je velmi pesimistický. Známe-li rozptyly měřených veličin $s_{(A)}^2, s_{(B)}^2, \dots$, je přibližný odhad rozptylu ve tvaru

$$s_R^2 = \left(\frac{\partial R}{\partial A}\right)^2 s(A)^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial B}\right)^2 s(B)^2 + \dots + \rho$$

kde ρ je korelační koeficient. Pro případ, kdy jsou veličiny $A, B, \dots$ vzájemně nezávislé je $\rho = 0$.



Univerzita Palackého
v Olomouci

Zákon šíření (propagace) nejistot

- Pro nejběžnější případy matematických operací:

$$R = A + B - C \quad s_R = \sqrt{s_A^2 + s_B^2 + s_C^2}$$

$$R = \frac{A \cdot B}{C} \quad \frac{s_R}{R} = \sqrt{\left(\frac{s_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{s_B}{B}\right)^2 + \left(\frac{s_C}{C}\right)^2}$$

Function	s_R
$R = kA$	$s_R = k s_A$
$R = A + B$	$s_R = \sqrt{s_A^2 + s_B^2}$
$R = A - B$	$s_R = \sqrt{s_A^2 + s_B^2}$
$R = A \times B$	$\frac{s_R}{R} = \sqrt{\left(\frac{s_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{s_B}{B}\right)^2}$
$R = \frac{A}{B}$	$\frac{s_R}{R} = \sqrt{\left(\frac{s_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{s_B}{B}\right)^2}$
$R = \ln(A)$	$s_R = \frac{s_A}{A}$
$R = \log(A)$	$s_R = 0.4343 \times \frac{s_A}{A}$
$R = e^A$	$\frac{s_R}{R} = s_A$
$R = 10^A$	$\frac{s_R}{R} = 2.303 s_A$
$R = A^k$	$\frac{s_R}{R} = \left[k \frac{s_A}{A} \right]$



Univerzita Palackého
v Olomouci

Zákon šíření nejistot – metody v SW

- METODA SIMULACÍ MONTE CARLO:** jedná se o univerzální postup simulačních experimentů s použitím náhodných čísel, který je vhodný i k simulaci statistického chování komplexních systémů. Jsou generovány simulované odhady výsledků R_i .
- Pro soubor těchto výsledků (bývá jich nejméně 300) se vypočtou odhady střední hodnoty (R) a směrodatné odchylky (s_R).
- Výsledkem je bodový a intervalový odhad střední hodnoty (průměr nebo medián).
- Medián je spolehlivějším odhadem střední hodnoty než aritmetický průměr u asymetrických dat, nebo dat s velkou špičatostí.
 - Symetrii lze posoudit v grafu hustoty pravděpodobnosti.

Šíření chyb - Nejistoty

Název úlohy: Tablety

Rovnice: $x1 \cdot x2 \cdot (y1)^{0.33}$

Parametr	Průměr	Sm. Odch.	Data
X1	31	2.2	Y1: hmotnost1
X2	0.3	0.02	Y2: -nic
X3			Y3: -nic
X4			Y4: -nic
X5			Y5: -nic
X6			Y6: -nic
X7			Y7: -nic
X8			Y8: -nic

Počet simulací: 1000

Výstupy: ☒ Vstupní data, ☒ Taylorův rozvoj, ☒ Cílivostní analýza, ☐ Simulovaná data

Buttons: ? Nápověda, X Zpět, OK

Okno z programu QC Expert



Univerzita Palackého
v Olomouci

Zákon šíření nejistot – metody v SW

- **METODA TAYLOROVA ROZVOJE:** provádí se rozvoj do Taylorovy řady v okolí středních hodnot do druhého řádu. Hodnoty funkce se aproximují polynomem. Tato metoda bere v úvahu i možné korelace mezi proměnnými.
- **Výsledky:**
 - aritmetický průměr – méně vhodný odhad střední hodnoty,
 - opravený průměr – odhad střední hodnoty bez uvažování korelace,
 - opravená směrodatná odchylka (odhad s_R),
 - průměr s kovariancí – odhad střední hodnoty s korelačním členem,
 - opravená směrodatná odchylka s kovariancí (odhad s_R).

$$\bar{R} \approx f(\bar{x}) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_i^2} s^2(x_i) + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=i+1}^m \frac{\partial^2 f(\bar{x})}{\partial x_i \partial x_j} \text{cov}(x_i, x_j)$$

kde x nahrazuje proměnné $A, B, \dots$