Univerzita Palackého v Olomouci

Zákon šíření nejistot

Chemometrie I (ACH/CHEX1)

1

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, ..., zatížených nejistotami platí, že pro R = f(A, B, ...) je nejistota:

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

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

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

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

2

Univerzita Palackého
v Olomouci

Zákon šíření (propagace) nejistot

- Pro nejběžnější případy matematických operací:

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

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

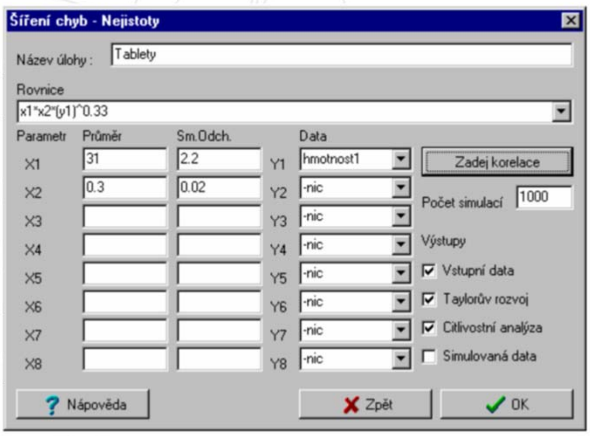
Function	s_R
$R = kA$	$s_R = ks_A$
$R = A + B$	$s_R = \sqrt{s_A^2 + s_B^2}$
$R = A - B$	$s_R = \sqrt{s_A^2 + s_B^2}$
$R = A \times B$	$\frac{s_R}{R} = \sqrt{\left(\frac{s_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{s_B}{B}\right)^2}$
$R = \frac{A}{B}$	$\frac{s_R}{R} = \sqrt{\left(\frac{s_A}{A}\right)^2 + \left(\frac{s_B}{B}\right)^2}$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

3

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 ($\bar{R}$) 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.



Okno z programu QC Expert

4

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).

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

kde x nahrazuje proměnné A, B, …

5