



不確かさ評価への モンテカルロ法の応用

2016年9月7日

公益財団法人 日本適合性認定協会

技能試験技術部 小島勇夫

参考文献:

(1) EURACHEM/CITAC による不確かさガイド:
(Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement:
EURACHEM CITAC Guide CG4, Third Edition, 2012年))

・WEBサイトからダウンロード

<http://www.eurachem.org/index.php/publications/guides/>

・日本語訳:分析値の不確かさ—求め方と評価、日本分析化学会監訳、米沢伸四郎訳、丸善出版

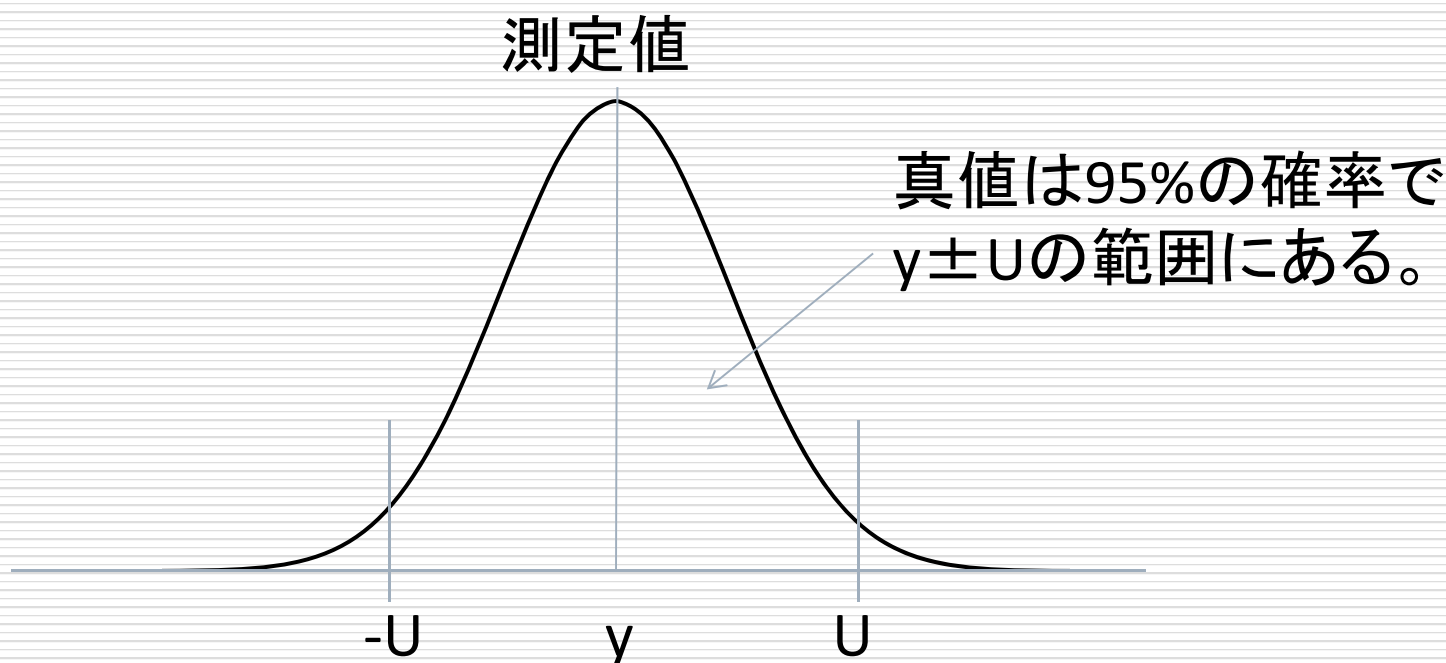
(2) GUM補足文書、ISO 98-3/Supplement 1
(JCGM101:2008)
モンテカルロ法による分布の伝播

不確かさの表現

測定結果 $y \pm U$

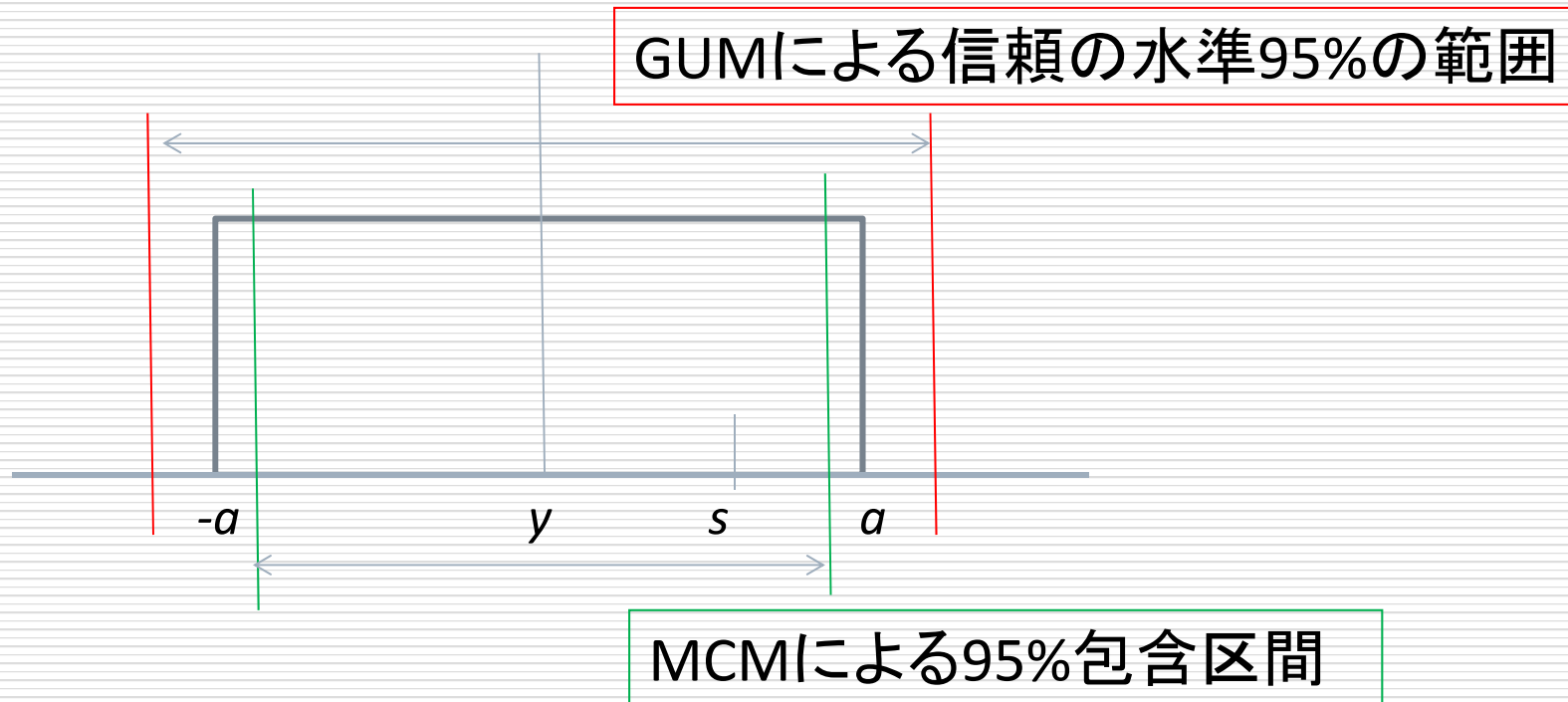


U は、包含確率95% (信頼の水準 約95%) に相当する拡張不確かさを表す。



測定結果が正規分布の場合は、 $U=2 u_c$ (u_c は合成標準不確かさ)

測定結果が矩形分布に従う場合:



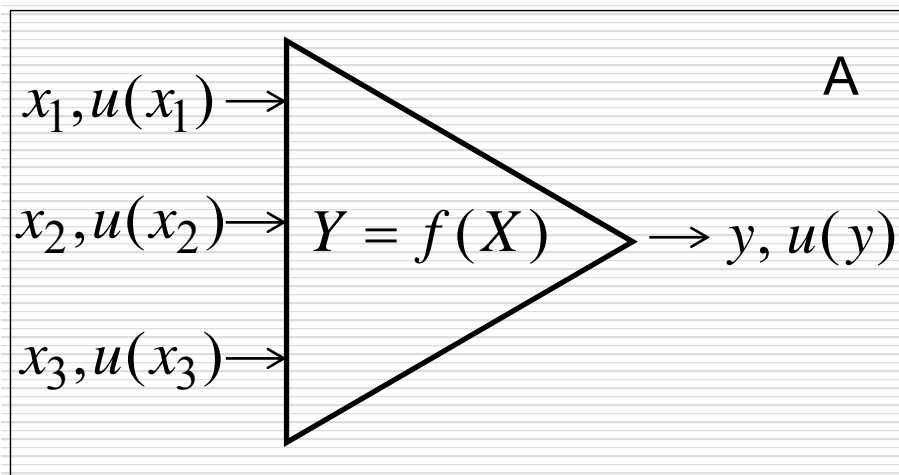
標準偏差; $s = a/\text{SQRT}(3)$

GUM拡張不確かさ; $U_{\text{GUM}} = 2 a/\text{SQRT}(3) = 1.15 a$

95%包含区間; $U_{\text{MCM}} = 1.65 a/\text{SQRT}(3) = 0.95 a$

GUM法

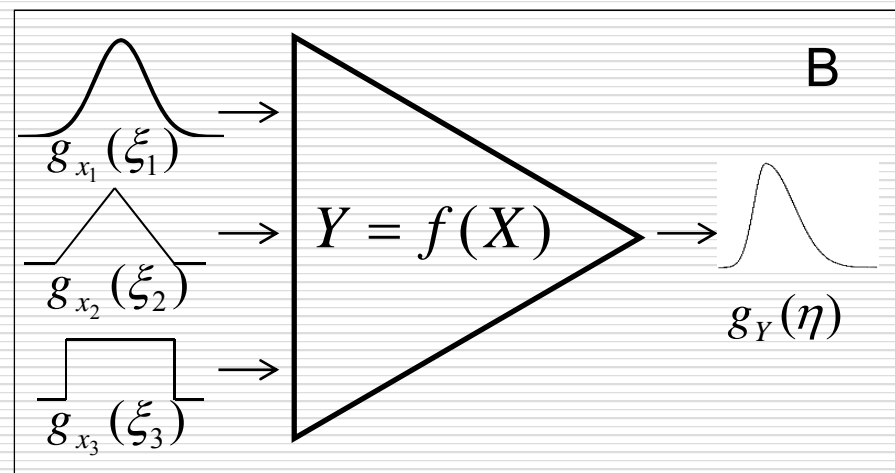
(A) 不確かさの伝播則



要因ごとの標準不確かさから伝播則により合成する。

モンテカルロ法

(B) 分布の伝播



要因ごとの確率分布からサンプリングして、多数回の測定シミュレーションから出力量の分布を求める。

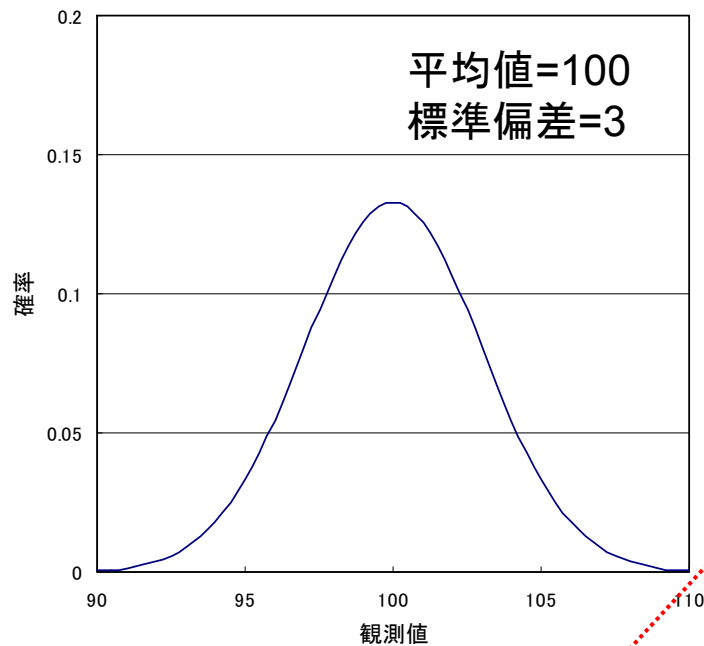
EXCELにおける確率密度分布に対応した乱数発生



確率分布

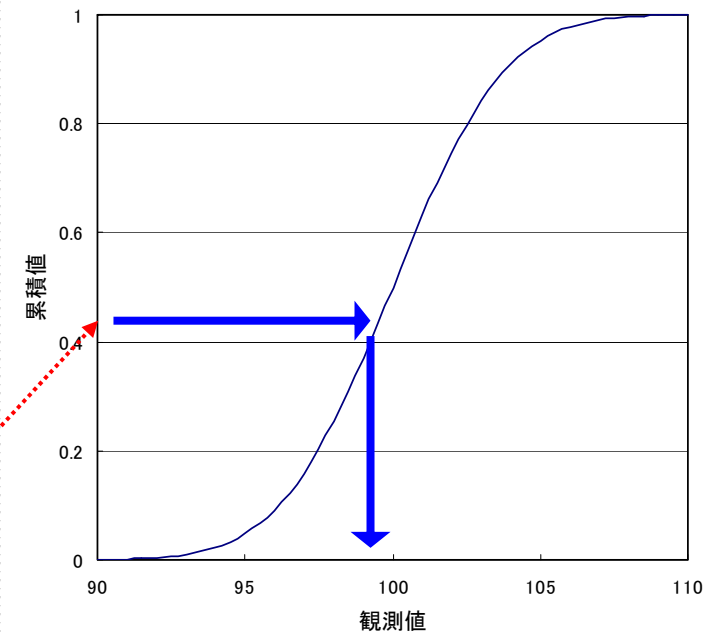
(正規分布を例にしている)

=NORMDIST(x, 100, 3, FALSE)



累積分布関数

=NORMDIST(x, 100, 3, TRUE)



累積分布関数の逆関数 = $\text{NORMINV}(\text{RAND}(), 100, 3)$

・縦軸の累積値の値をRAND()関数で発生して、対応する横軸の数値を求めると目的の分布に対する乱数となる。

EXCELにおける基準矩形分布乱数の生成



(0,1)区間の矩形分布乱数はEXCELでは次の2つの関数を用意されている。

1. EXCELシート RAND()

シート内のセルに”=RAND()”と記述する。
別のセルに追記すると新たな乱数が作成される。

2. EXCEL VBA Rnd()

マクロプログラムで、
Call Randmize
に続いて
r=Rnd()
のように使う。rは $0 < r < 1$ の矩形分布乱数を保存する。

(0,1)矩形分布乱数(基本矩形乱数)は、他の異なる確率分布からのサンプリングに用いられる。

表1 モンテカルロシミュレーションに用いる計算式

分布	PDF計算式
正規分布	$\text{NORMINV}(\text{RAND}(), x, u)$
矩形分布	
半幅, h	$x + 2 \cdot h \cdot (\text{RAND}() - 0.5)$
標準不確かさ, u	$x + 2 \cdot u \cdot \text{SQRT}(3) \cdot (\text{RAND}() - 0.5)$
三角分布	
半幅, h	$x + h \cdot (\text{RAND}() - \text{RAND}())$
標準不確かさ, u	$x + u \cdot \text{SQRT}(6) \cdot (\text{RAND}() - \text{RAND}())$
t分布	$x + u \cdot \text{TINV}(\text{RAND}(), v_{\text{eff}})$

事例:

測定された分析種の質量 a 、風袋共の質量 b 、容器の質量 c とするときの質量比

$$y = \frac{a}{b - c}$$

a 、 b 、 c の数値、標準不確かさ及び指定された分布を表E3.2の行3から5に与える。

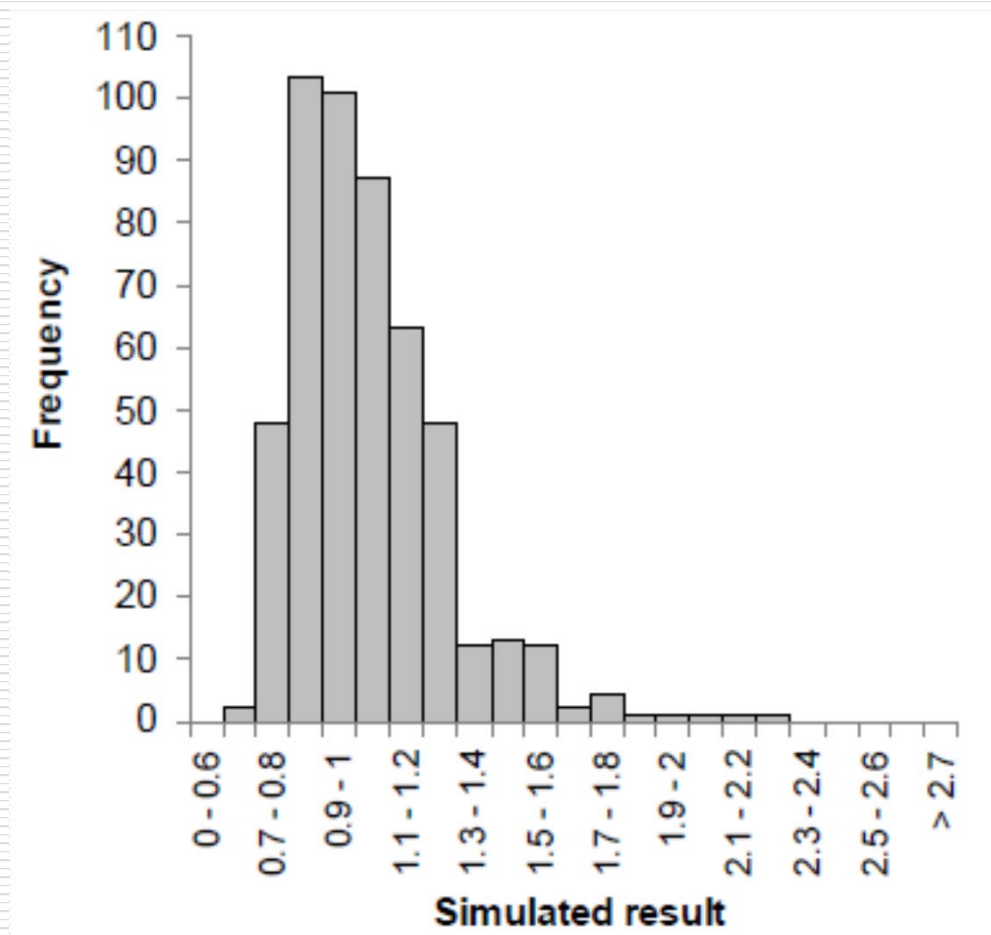
表E3.2: モンテカルロシミュレーションの スプレッドシート上での実行

	A	B	C	D	E	F	G
1							
2			a	b	c		y
3		Value	1.00	3.00	2.00		=C3/(D3-E3)
4		Standard uncertainty	0.05	0.15	0.10		=STDEV (G8:G507)
5		Distribution	Normal	Normal	Normal		
6							
7		Simulation	a	b	c		y
8			=NORMINV(RAND(), C\$3,C\$4)	=NORMINV(RAND(), D\$3,D\$4)	=NORMINV(RAND(), E\$3,E\$4)		=C8/(D8-E8)
9			1.024702	2.68585	1.949235		1.39110
10			1.080073	3.054451	1.925224		0.95647
11			0.943848	2.824335	2.067062		
12			0.970668	2.662181	1.926588		
⋮			⋮	⋮	⋮		
506			1.004032	3.025418	1.861292		0.86248
507			0.949053	2.890523	2.082682		1.17480
508							

1個の観測値

1組の観測による
計算(測定)値

図3.1 シミュレーション結果のヒストグラム

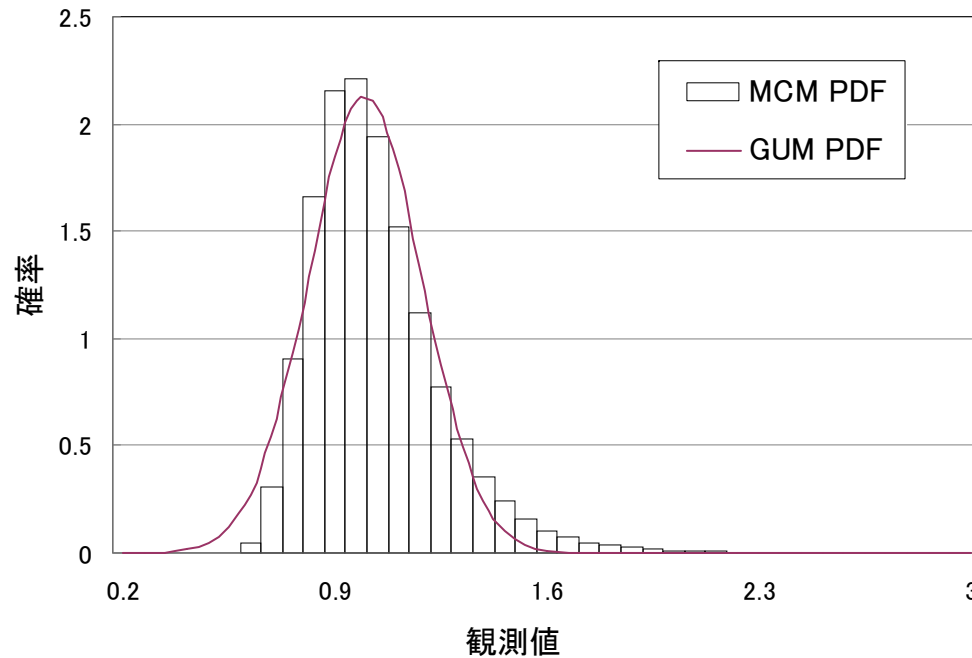


EXCELシートで実行: サンプル数を500回としたときの変化を確認

EXCELマクロプログラムで計算



MCMとGUMの比較



MCS繰返し回数
200000回

	Average(x)	u(x)	y(Low)95%	y(High)95%
MCM	1.04	0.22	0.68	1.46
GUF	1.00	0.19	0.63	1.37

ISO Guide 98-3/S.1 (JCGM 101)

5.10 Conditions for the valid application of the described Monte Carlo method

MCMを適用するための前提条件

- a) 関数 f は入力量 X_i の最良推定値 x_i の近傍で X_i について連続であること。
- b) 出力量 Y の分布関数は連続であり、厳密に増加関数であること。
- c) y のPDFは、最小の包含区間を一意に決定できること。その必要条件を次にあげる。
 - 1) PDFが厳密に正である区間で連続
 - 2) 単峰形
 - 3) 峰の左側では厳密に増加関数で、右側では厳密に減衰関数であること
- d) Y の期待値 $E(Y)$ とその分散 $V(Y)$ が存在すること。
- e) 十分に大きな数のMCMの繰返しが行えること。

参考情報: NISTホームページ

計算プログラム

<http://uncertainty.nist.gov/>

説明書

<http://uncertainty.nist.gov/>

NISTUncertaintyMachine-UserManual.pdf

ご清聴ありがとうございます。

質問などは下記へ！

Isao.Kojima@jab.or.jp