

モンテカルロ法を用いた 不確かさ評価

公益社団法人 日本分析化学会
標準物質・技能試験委員会事務局
小島勇夫

参考文献:

- (1) 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
- (2) 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:分析値の不確かさー求め方と評価、日本分析化学会監訳、米沢仲四郎訳、丸善出版
- (3) 計測標準と計量管理、小島勇夫、Vol.66, No.4, 24頁,
2017、「EXCELを用いたモンテカルロ法による不確かさ計算」

モンテカルロ法(Monte Carlo method)

モンテカルロ法:

シミュレーションや数値計算を乱数を用いて行う手法の総称。

元々は、中性子が物質中を動き回る様子を探るためにジョン・フォン・ノイマンにより考案された手法。カジノで有名な国家モナコ公国の4つの地区(カルティ)の1つであるモンテ・カルロから名付けられた。

(ウィキペディア)

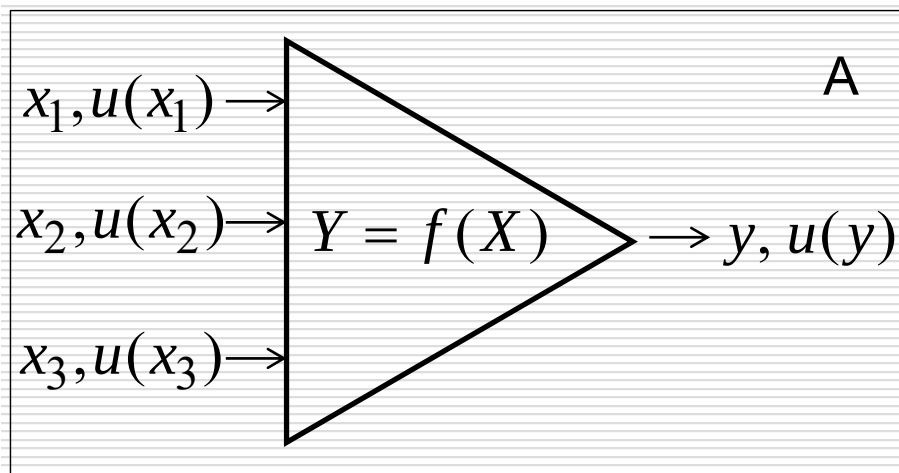
・難解な物理現象の解析にも適用できるが、不確かさ計算や技能試験のシミュレーションなどの比較的簡単な対象についてはパソコンがあれば誰でも利用可能な手法である！！

・計算機実験ともいう。

QUAM2012 附属書 E.3.2 原理

GUM法

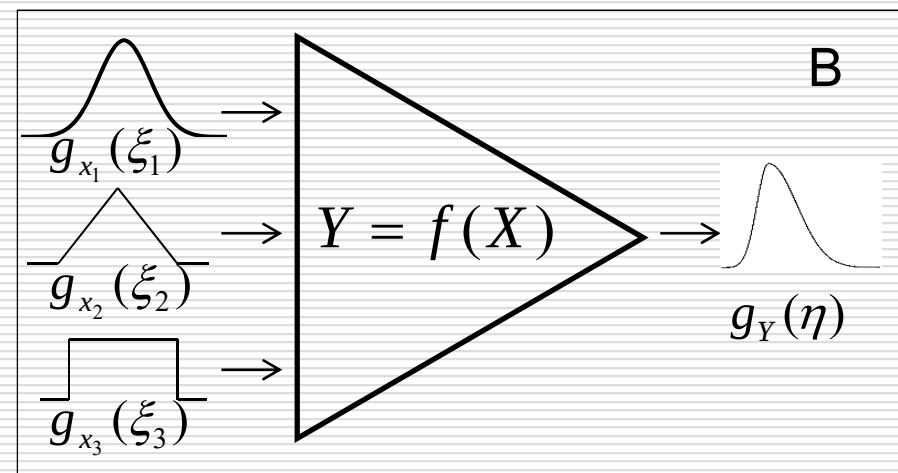
(A) 不確かさの伝播則



要因ごとの標準不確かさから伝播則により合成する。

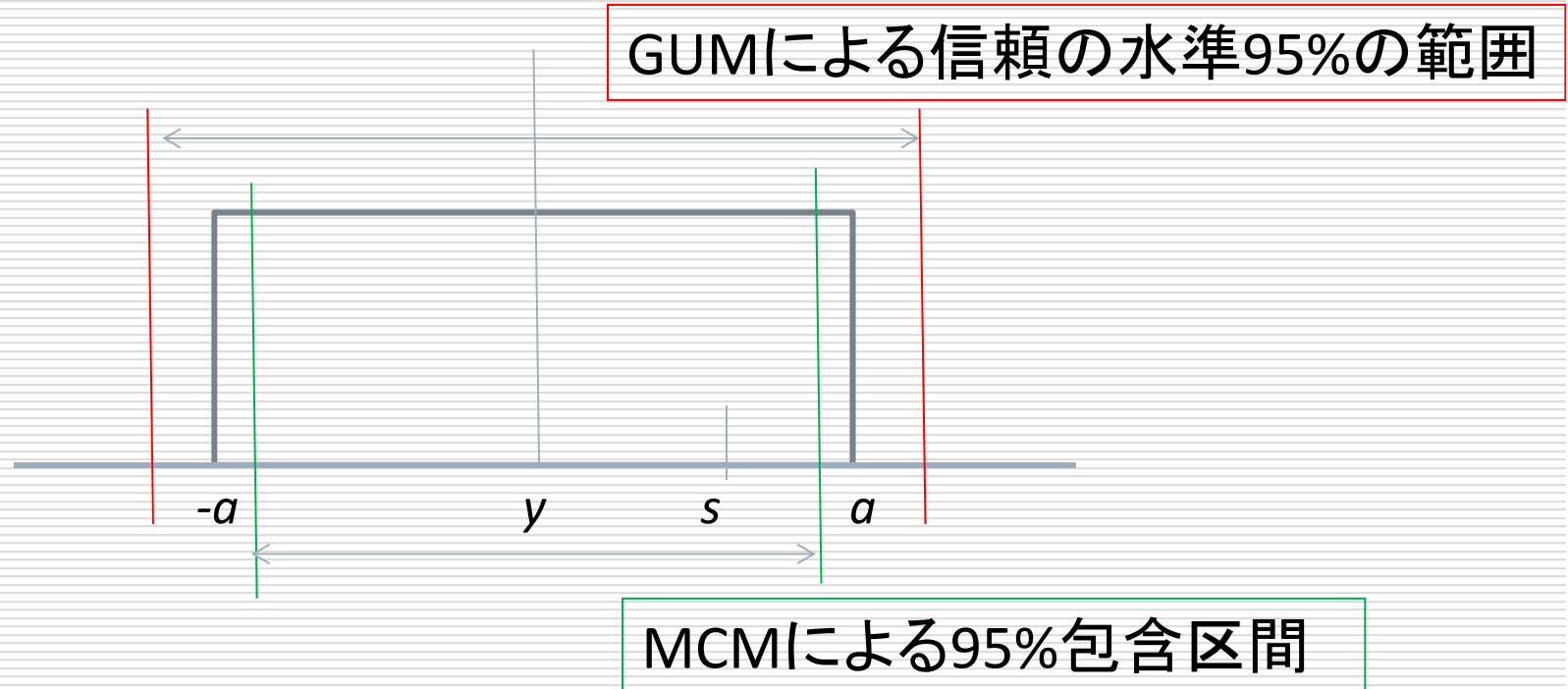
モンテカルロ法

(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、多数回の測定のシミュレーションから出力量の分布を求める。

GUMとMCM: 矩形分布



標準偏差; $s = a/\text{SQRT}(3)$

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

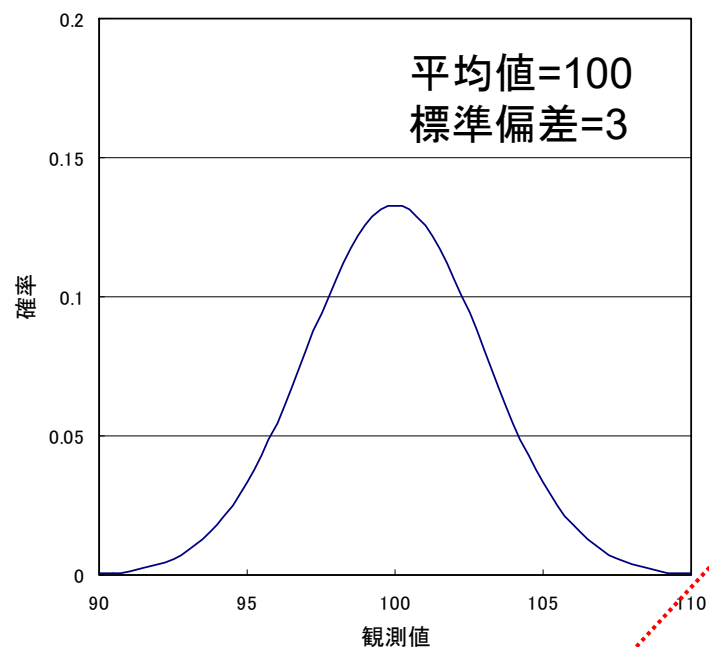
95%包含区間; $U_{\text{MCM}} = 1.65 a/\text{SQRT}(3) = 0.95 a$

EXCELにおける確率密度分布に対応した乱数発生

確率分布

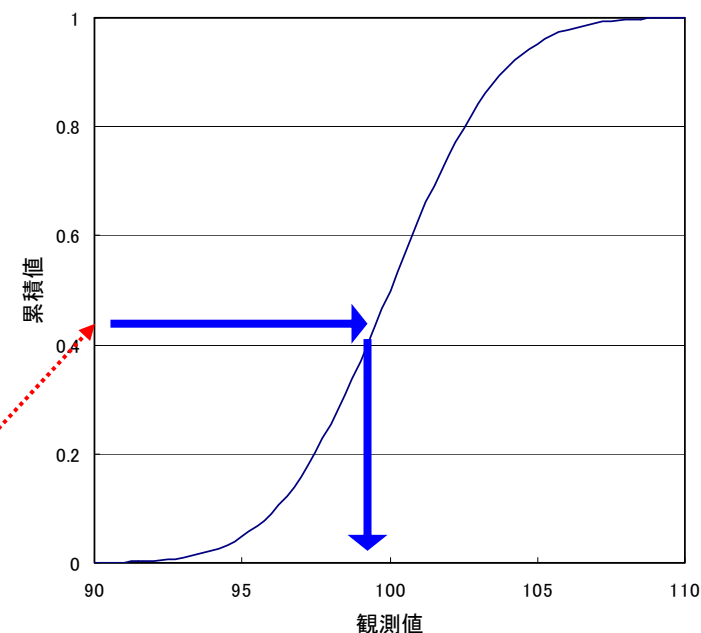
(正規分布を例にしている)

=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 = **NORMINV(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。

QUAM2012 附属書 E.3.4

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	$x + u \cdot \text{TINV}(\text{RAND}(), v_{\text{eff}}) \cdot \text{SIGN}(\text{RAND}() - 0.5)$

QUAM2012 附属書 E.3.4

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。

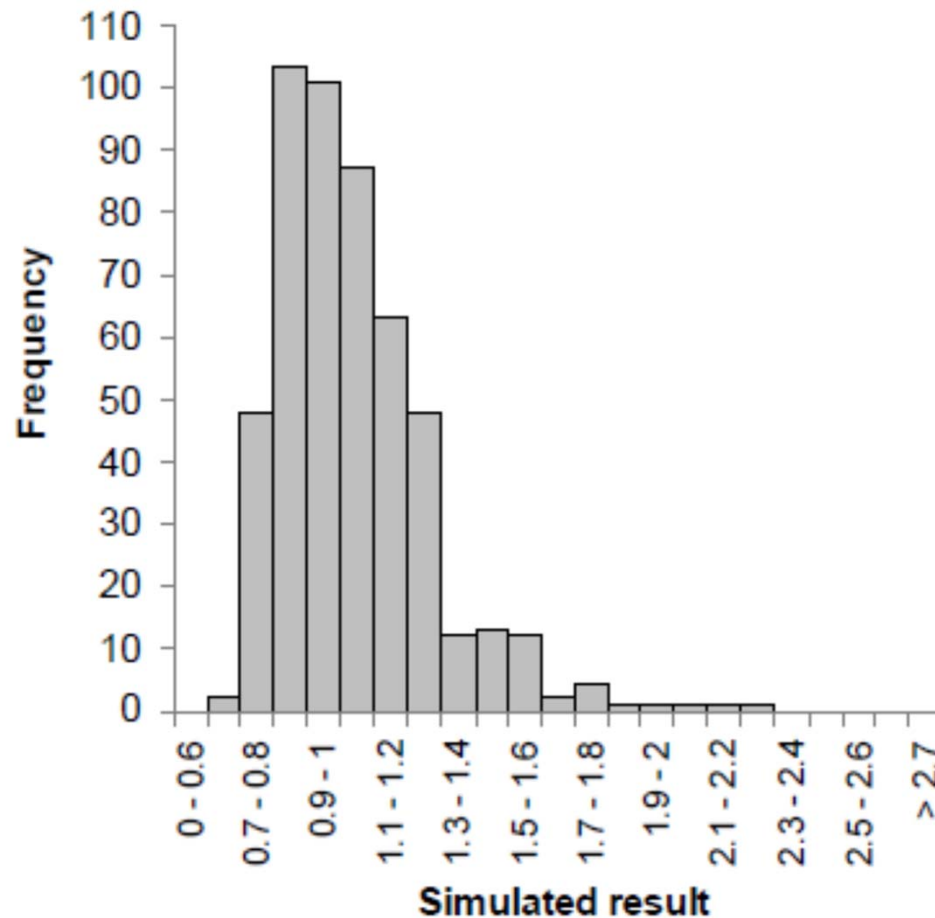
表E3.2: モンテカルロシミュレーションの
スプレッドシート上での実行

	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

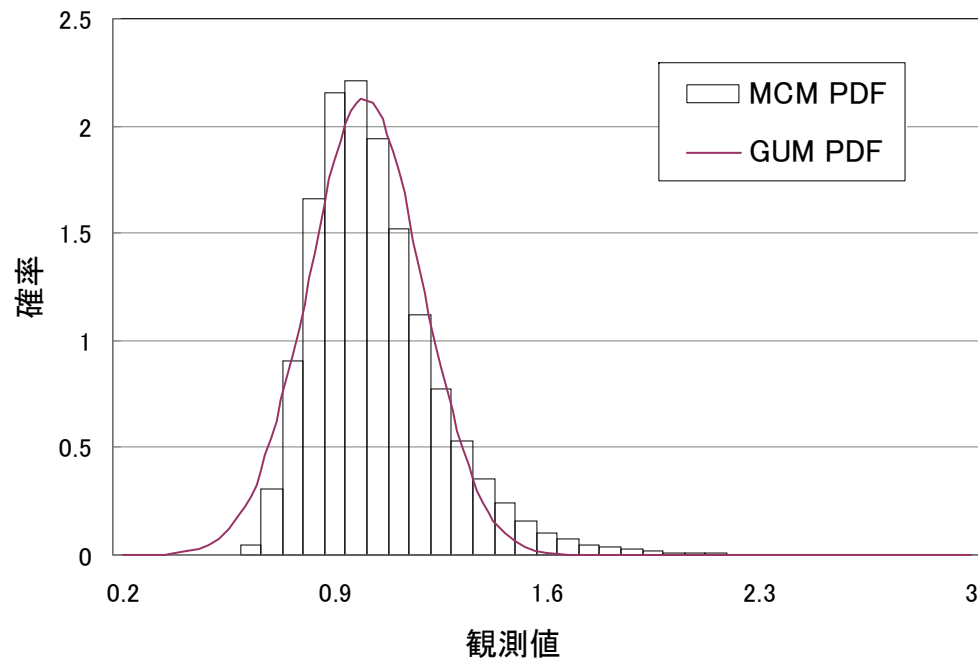
図3.1 シミュレーション結果のヒストグラム



EXCELシートで実行：サンプリング数を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

マクロプログラムの入力法

要因数？	3	MCM数？	200000	包含確率？	0.95
------	---	-------	--------	-------	------

要因番号	U/R ?	分布？	最良推定値 /a ?	標準不確か さ/b ?	自由度/d ?	説明・単位
1	U	NORM	1	0.05		
2	U	NORM	3	0.15		
3	U	NORM	2	0.1		
4						
5						
6						
7						
8						
9						
10						

GUM計算？	Yes	合成uc	0.187	包含係数？	2
--------	-----	------	-------	-------	---

Graph範囲？	0	3	61
----------	---	---	----

自動的に計算される

モデル関数の入力

マクロプログラム中にタイプする。

Function **Model_Equation**(N As Long, x() As Double)

' モデル式を記述する。x(i)は種々の入力値を表すので注意する。

' 特別なチェックはされていないので要注意

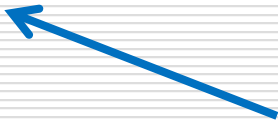
' N : Number of Inputs

' y = 0: For j = 1 To N: y = y + x(j): Next j

y = x(1) / (x(2) - x(3))

Model_Equation = y

End Function


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

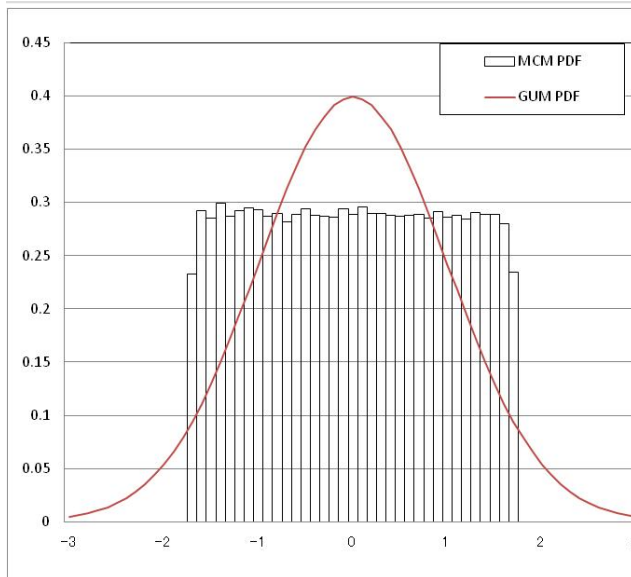
選択できる確率密度関数

入力規則	U	R	
NORM	x0, ux	—	正規分布
tDIST1	x0, ux, Df	—	t分布(校正証明書等による)
tDIST2	x0, ux, Df	—	t分布(複数の観測値による)
RECT	x0, ux	a, b	矩形分布
TriA	x0, ux	a, b	三角分布
Utype	—	a, b	U字分布
CTRAP	—	a, b, d	曲線を持つ台形分布

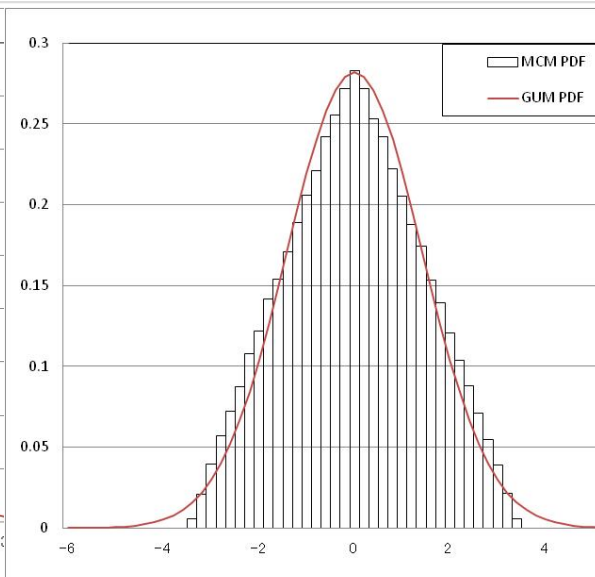
詳細は、スライド2の参考文献(1) 6章を参照のこと。

矩形分布の加算

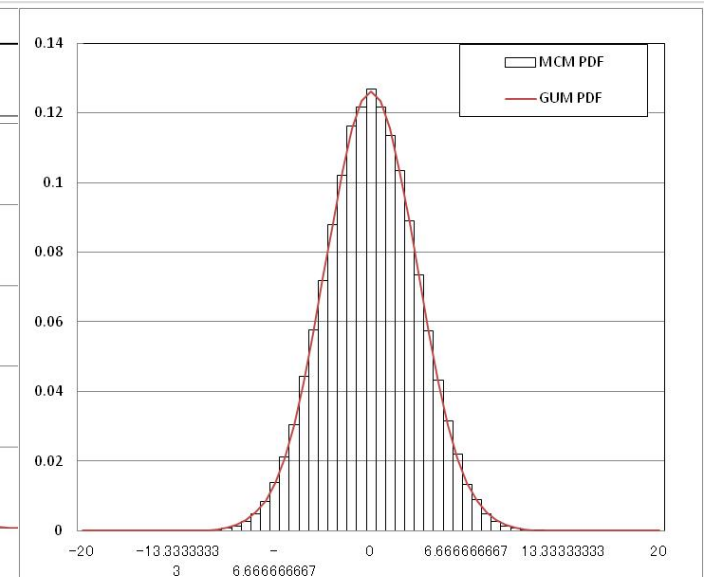
1個
矩形分布



2個加算
三角分布



10個加算
ほぼ正規分布



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、右側では厳密に減少関数であること
- 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！

i.kojima@jsac.or.jp