TEKNOLOGISK
INSTITUT

it's all about innovation

Monte Carlo-metoder til fastlæggelse af måleusikkerhed i forbindelse med flowmåling

Temadag: Flow og energimåling til forsyningerne, 3. dec. 2013

Morten Karstoft Rasmussen, Kalibrering, Energi og Klima, Teknologisk Institut i Aarhus

Morten Karstoft Rasmussen

TEKNOLOGISK INSTITUT

- Fysiker (Aarhus Universitet 2011)
- Faglig ansvarlig i tryklaboratoriet, sektion for kalibrering, Teknologisk Institut i Århus
- Begrænset praktisk erfaring med flowmåling
- Arbejder på tværs af kalibreringslaboratorierne
  - Indenfor måleteknologi, herunder usikkerhedsberegning, dataopsamling, dataanalyse og kalibreringssoftware
- Deltagelse i forskellige F&U projekter indenfor metrologi i samarbejde med andre europæiske institutter
  - Fx Metrologi ifm. sensornetværk
- Herudover deltagelse i nationale projekter indenfor energi og klima
  - Fx projekter indenfor energilagring

Indhold

TEKNOLOGISK INSTITUT

- Hvad er usikkerhedsberegning?

- Monte Carlo-metode vs. ”traditionel” usikkerhedsberegning
  - Hvad er fordelene ved **MCM**, hvordan og hvor kan den anvendes?
  - Traditionel usikkerhedsberegning: Evaluation of measurement data — **G**uide to the expression of **u**ncertainty in **m**easurement (herefter **GUM**)

- Hvad er en Monte Carlo-metode?
  - Illustrativt eksempel på implementering af en Monte Carlo-metode
  - Hvordan anvendes Monte Carlo-metoden til usikkerhedsberegning?
  - Hvad giver Monte Carlo-metoden af information, og hvor nøjagtig er den?
  - Hvorfor er ”traditionelle” metoder ikke altid tilstrækkelige?

- Monte Carlo-metoden anvendt i den virkelige verden
  1. Validering af usikkerhedsbudget for afvejning af 30 kg vand i en 100 kg vejetank
  2. Beregning af den samlede usikkerhed på en temperaturmåling (dynamisk MCM)
  3. Dynamisk flowmåling – mikroflow setup (1 mL/h – 6 L/h)
     - Beregning af usikkerhed på regressions-parametre

Hvad er en Monte Carlo-metode?

TEKNOLOGISK INSTITUT

- Anvendelig når:
  - Der ikke eksisterer en analytisk løsning
  - En traditionel numerisk løsningsmetode er utilstrækkelig eller vanskelig at implementere
  - Usikkerhedsberegninger skal valideres

- Fremgangsmåde:
  1. Opstil en model der beskriver den størrelse du vil beregne, og definer de relevante input-variable.
  2. Udtag repræsentative stikprøver fra de stokastiske variable
  3. Disse stikprøver anvendes herefter sammen med modellen i den videre analyse til at opnå et numerisk estimat på den ønskede størrelse.

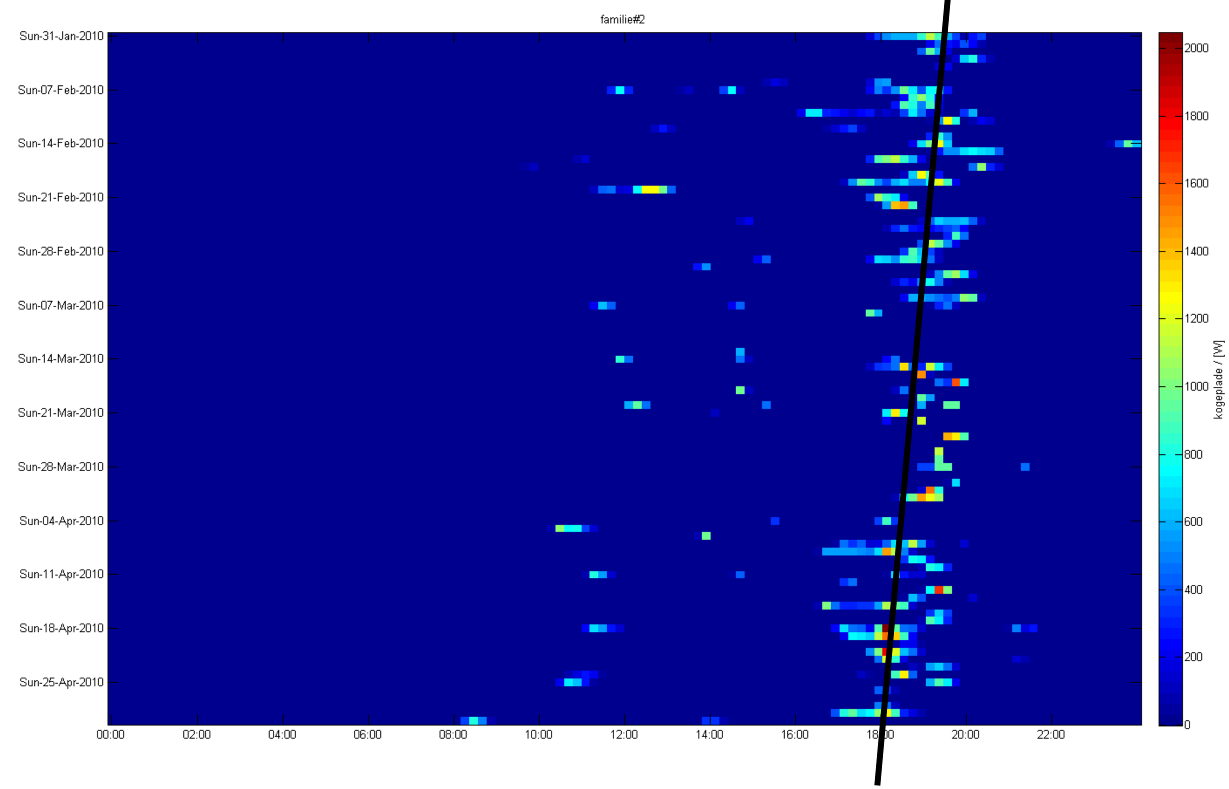
Navnet refererer til "the Monte Carlo Casino" på grund af metodens analogi til roulettens "stikprøveudtagning"

TEKNOLOGISK
INSTITUT

Hvorfor er bestemmelse af usikkerheden vigtig?

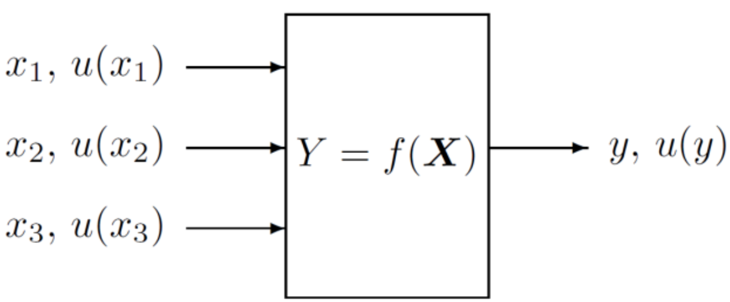
- EnergyFlexHouse - kogepeak
  - Er tidsforskydning signifikant?
- Andre eksempler: Lækage i vandrør?
  - Er ind/ud flow signifikant forskellige?

1 minut/døgn

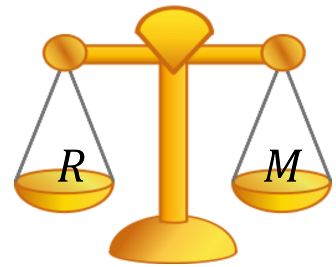


Usikkerhedsberegning

- En målestørrelse, Y, kan sjældent bestemmes direkte
- Men bestemmes ofte indirekte ud fra en række målinger beskrevet ved X_i
- Modelligning, f, beskriver hvordan den relevante målestørrelse afhænger af målingerne
  - x_1 og x_2 er estimater på hhv. X_1 og X_2
  - $u(x_1)$ og $u(x_2)$ er standardusikkerheden på inputestimaterne
  - y er et estimatet på Y, dvs. måleresultatet med en tilhørende standardusikkerhed $u(y)$



GUM – metode til beregning af usikkerhed (law of propagation)



TEKNOLOGISK INSTITUT

Vægt med 1g opløsning

- **Eksempel**, bestemmelse af lod-masse ved vejning kan fx beskrives således:
  - $M = A + R$

    M: Massen af loddet der skal bestemmes

    A: Aflæst masseforskel

    R: Referenceloddets masse
- Estimat på A fås ved vejning:
  - $a = 10\ \text{g}$
  - $u(a) = \frac{1\ \text{g}}{2\sqrt{3}} \approx 0.29\ \text{g}$
- Et estimat på R fås fra kalibreringscertifikat
  - $r = 100.01\ \text{g}$
  - $u(r) = \frac{0.30\ \text{g}}{2} = 0.15\ \text{g}$
- Måleresultatet (estimat på M):
  - $m = a + r = 110.01\ \text{g}$
  - $u(m) = \sqrt{u(r)^2 + u(a)^2} = 0.33\ \text{g}$

Usikkerhedsberegning vha. Monte Carlo-metoden

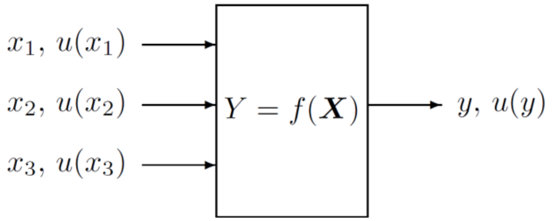
TEKNOLOGISK INSTITUT

- Monte Carlo metoden er en computerimplementeret algoritme der beror på gentagen tilfældig stikprøveudtagning (random sampling) til at beregne resultatet
- Altså, generering af stokastiske (random) værdier, i stedet for analytiske beregninger
- MCM til beregning af usikkerhed bliver mere og mere udbredt[2] (egentlig opfundet i 1940'erne men først rigtig anvendeligt siden sidst I 80'erne)

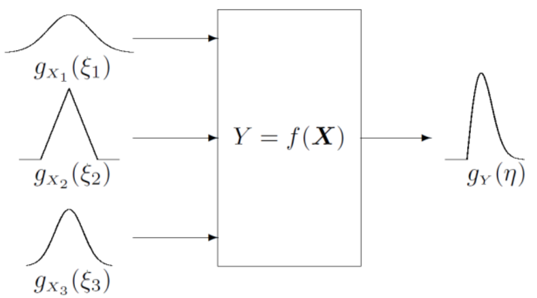
- GUM og MCM er begge approximative metoder
- Dog er MCM er mere valid end GUM (under bestemte forudsætninger), hvilket retfærdiggør anvendelse til validering

- Kombinering af sandsynlighedsfordelinger er generelt meget vanskeligt, dette er muligt med MCM (til en vilkårlig nøjagtighed afhængig af sampling-størrelse)
- hermed propageres mere end blot et "statisisk sammendrag" (ophobningsloven som beskrevet I GUM)

- MCM er et værdifuldt alternativ til GUM når
    - Modelligningen er ikke-lineær i inputvariablene
    - Målestørrelsens sandsynlighedsfordeling afviger fra en normalfordeling (eller en t-fordeling)



Deterministisk model (GUM): et sæt input parametre projekteres direkte over på et sæt output variable:



Propagering af fordelinger (MCM): modellens egenskaber bestemmes uden statistisk bias

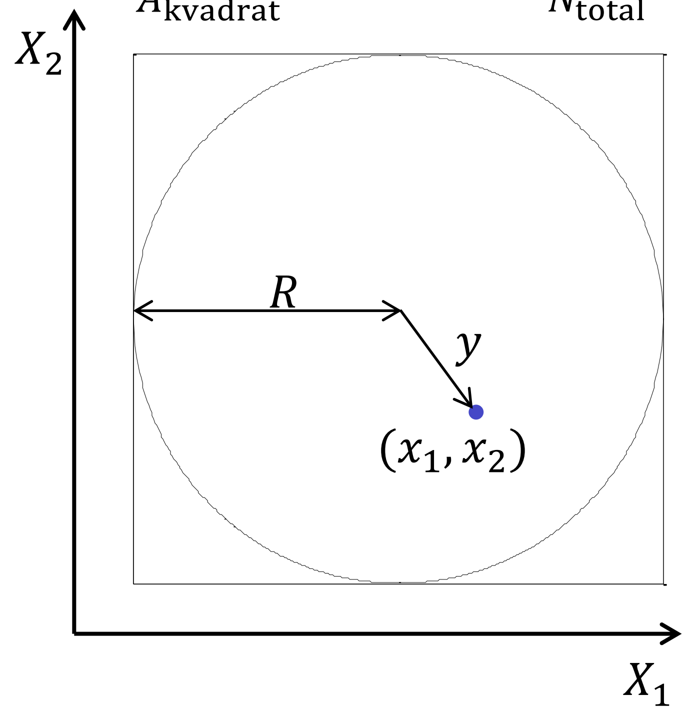
[1]JCGM (2008). JCGM 100:2008 - Evaluation of measurement data — Guide to the expression of uncertainty in measurement.
[2]JCGM (2008). JCGM 101:2008 Evaluation of measurement data — Propagation of distributions using a Monte Carlo method.

Eksempel: estimering af π vha. en Monte Carlo-metode

- **Fremgangsmåde og antagelser:**
  - Kast en håndfuld riskorn ind i kvadratet til højre
  - Sandsynligheden for at ramme et givent areal er propertionalt til størrelsen af dette areal.
  - Tæl antallet af riskorn inden for kvadratet, og noter hvor mange af disse der også er inden for cirklensradius.

1. **Opstil model:**
   - $Y^2 = X_1^2 + X_2^2$
   - X_1 og X_2 er uniform fordelte med samme bredde (R) og middelværdi
2. **Udtag stikprøve:**
   - Brug en computer til at udtage N stikprøver fra en bivariat uniform fordeling
3. **Analyser udfaldet:**
   - Undersøg modellens fordeling $(Y < R)$
   - $4\frac{N_{\text{cirkel}}}{N_{\text{total}}} = 4\frac{1}{1} = \mathbf{4}\ (\pi = 3.14159)$

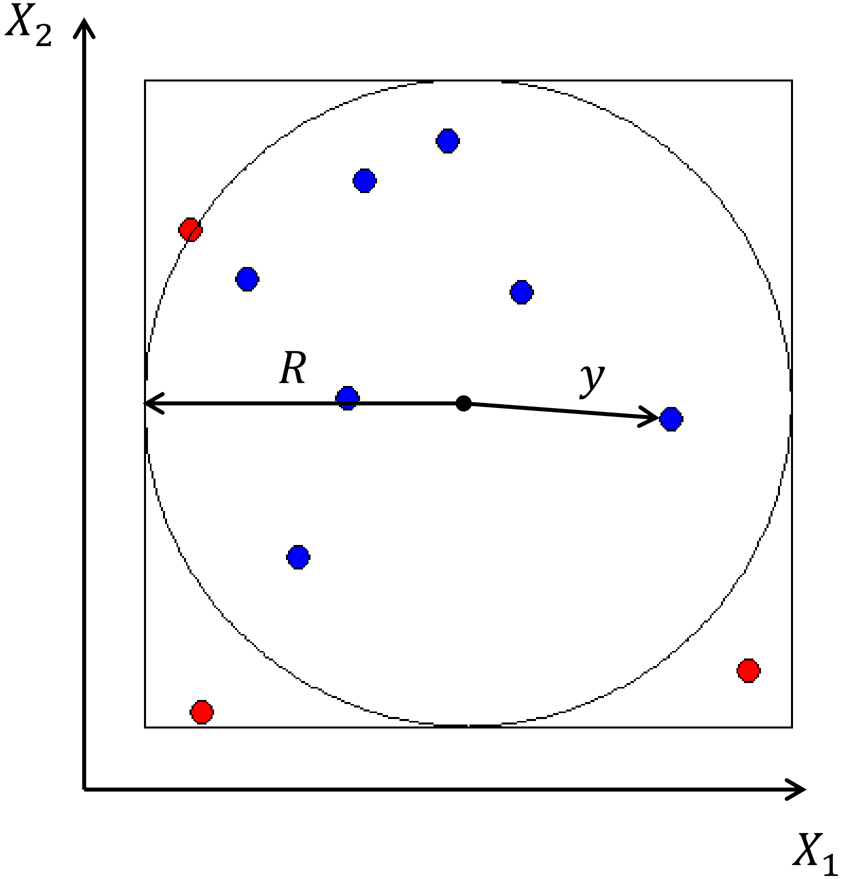
$$4\frac{A_{\text{cirkel}}}{A_{\text{kvadrat}}} = \pi \qquad 4\frac{N_{\text{cirkel}}}{N_{\text{total}}} \approx \pi$$

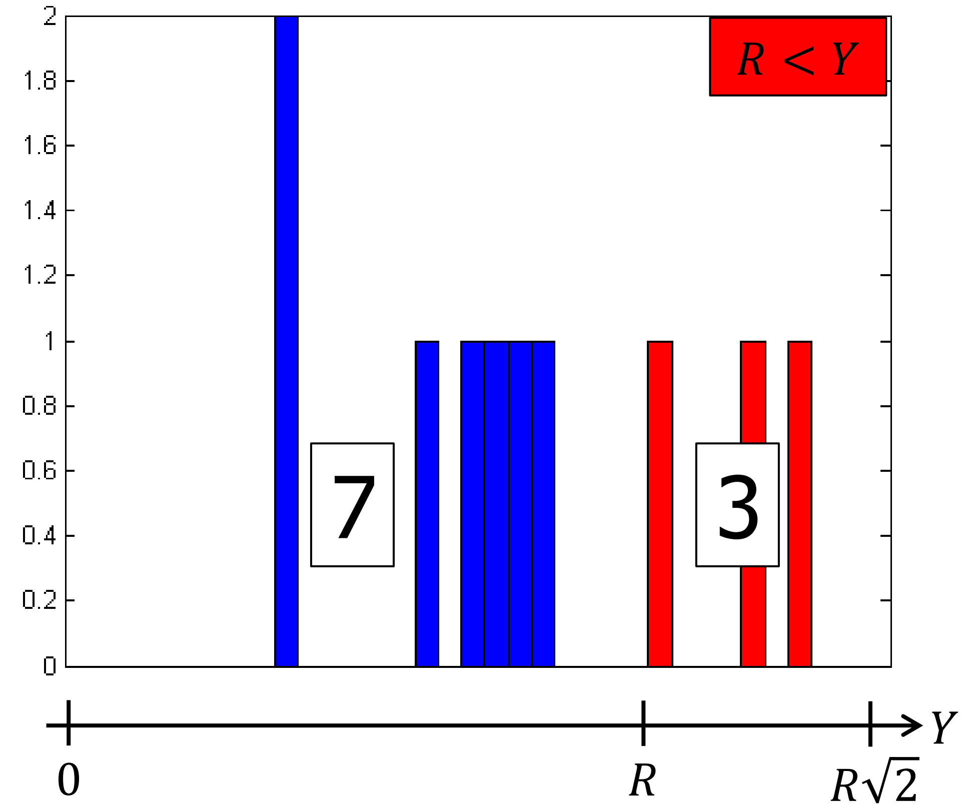


Eksempel: estimering af π
Sampling, N=10

$$\boxed{4 \cdot \frac{N_{\text{cirkel}}}{N_{\text{total}}} = 4 \cdot \frac{7}{10} = \mathbf{2.80}}$$

$(\pi = 3.14159)$



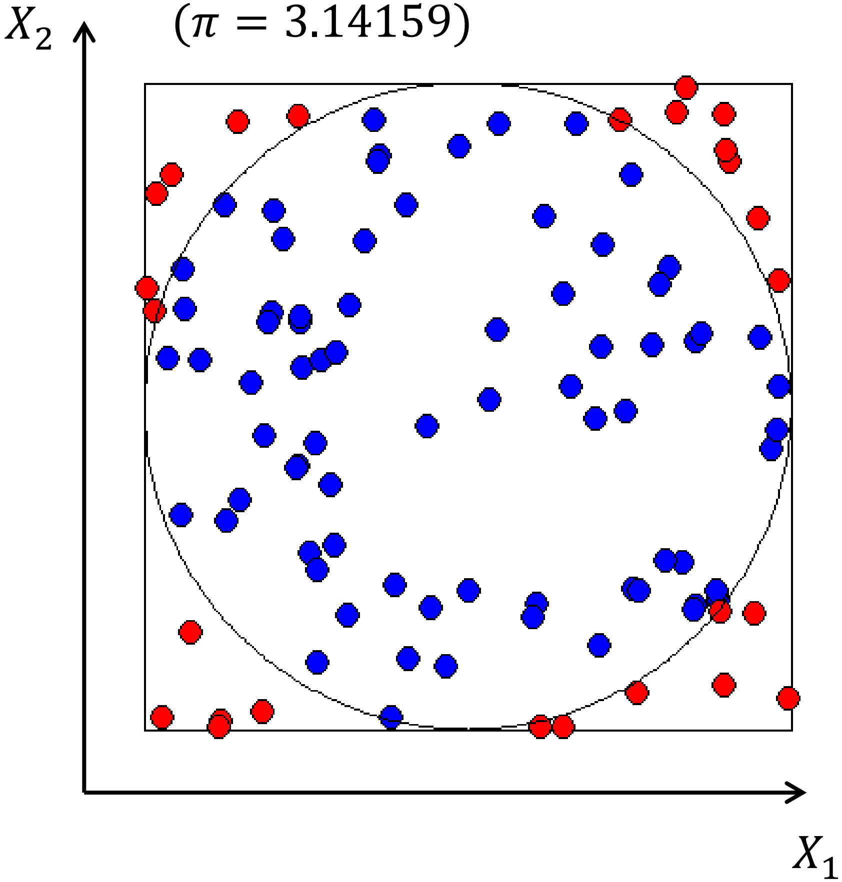


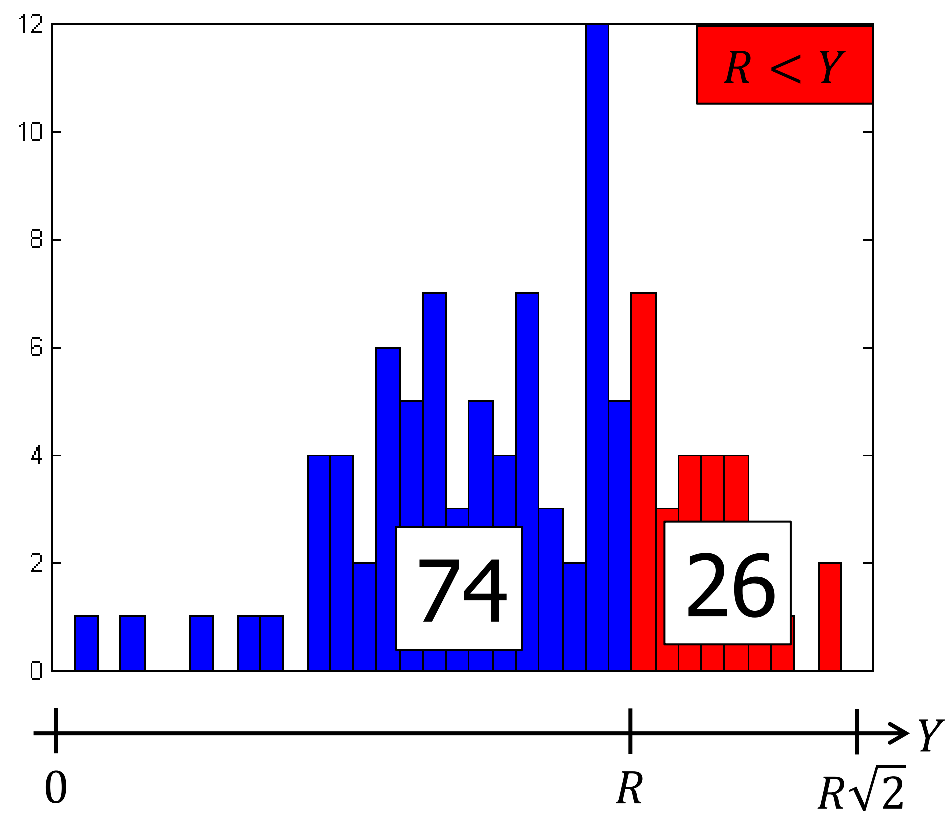
Eksempel: estimering af π
Sampling, N=100

$$\boxed{4 \cdot \frac{N_{\text{cirkel}}}{N_{\text{total}}} = 4 \cdot \frac{74}{100} = \mathbf{2.96}}$$

$(\pi = 3.14159)$

$(\pi = 3.14159)$



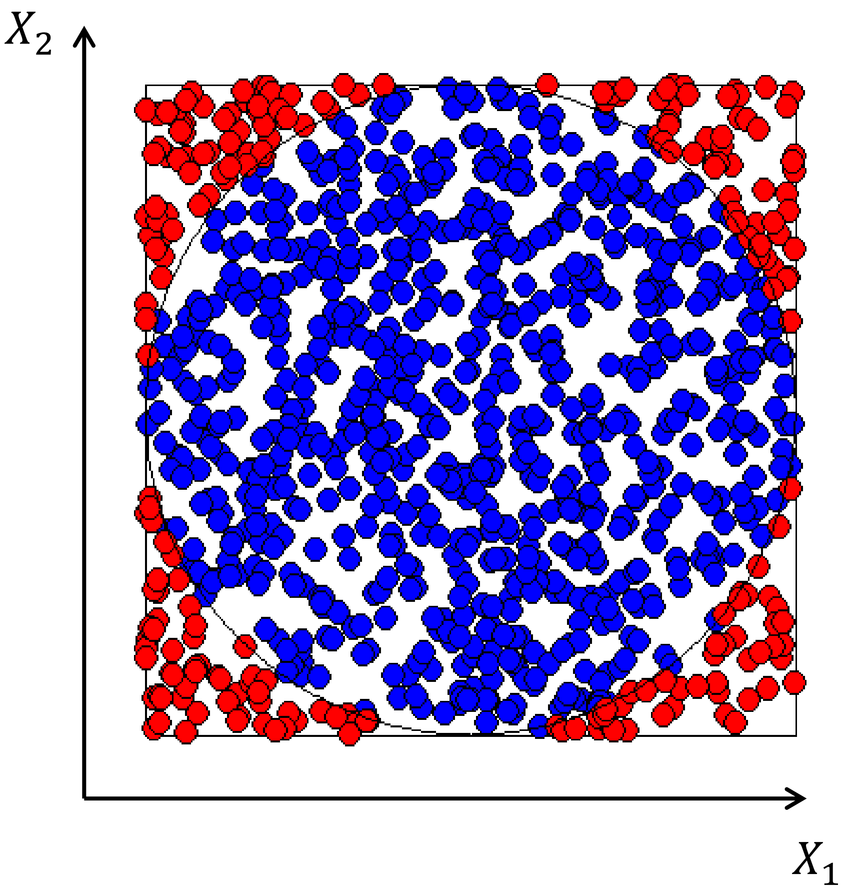


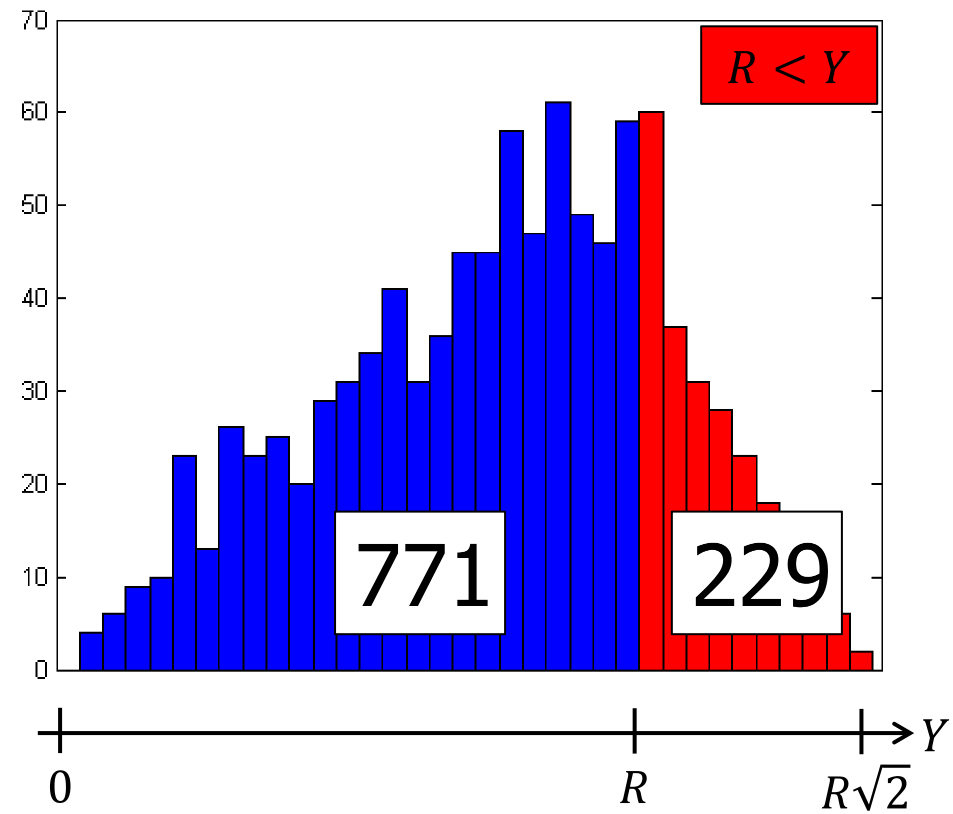
Eksempel: estimering af π

Sampling, N=1000

$$\boxed{4 \cdot \frac{N_{\text{cirkel}}}{N_{\text{total}}} = 4 \cdot \frac{771}{1000} = \mathbf{3.08}}$$

$(\pi = 3.14159)$

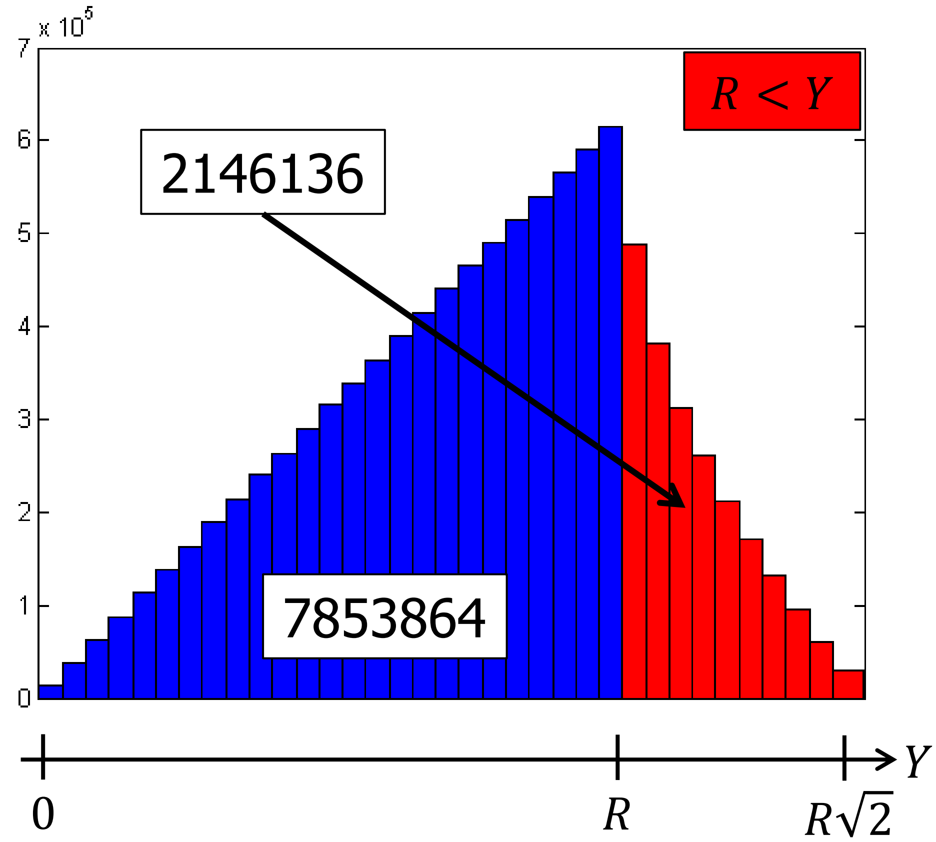




Eksempel: estimering af π

Sampling, N=10^7

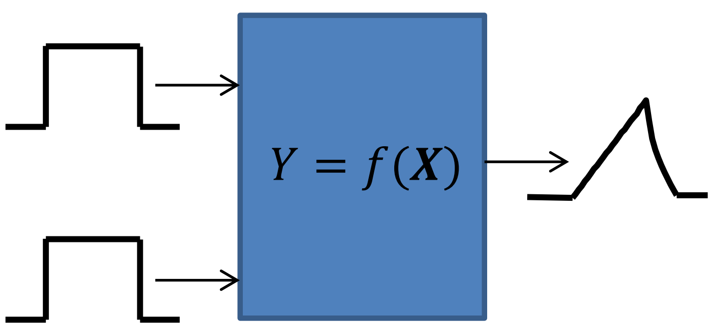
$$\boxed{4 \cdot \frac{N_{\text{cirkel}}}{N_{\text{total}}} = 4 \cdot \frac{7853864}{10^7} = \mathbf{3.14154}} \quad (\pi = 3.14159)$$



Eksempel: estimering af π

Konklusion

- Generelt for MCM kan man sige at:
  - Resultatets kvalitet øges med antallet af samples
  - Antal stikprøver $N_{\text{total}} \to \infty$
    - Så er resultatet eksakt
  - Man får et nøjagtigt billede af måleresultatets (modellens) fordeling



Skitsering af modellens sandsynlighedsfordeling

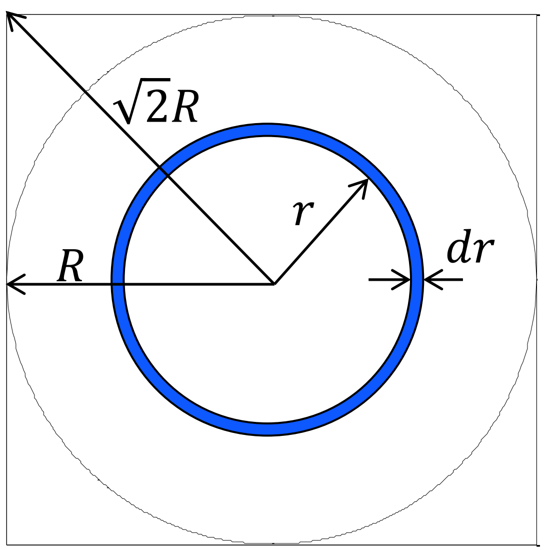
Antal stikprøver	Fejl i %
10^1	-11
10^2	8.2
500	-1.5
10^3	-0.43
10^4	-0.089
10^5	-0.041
10^6	0.0042
10^7	-0.0020

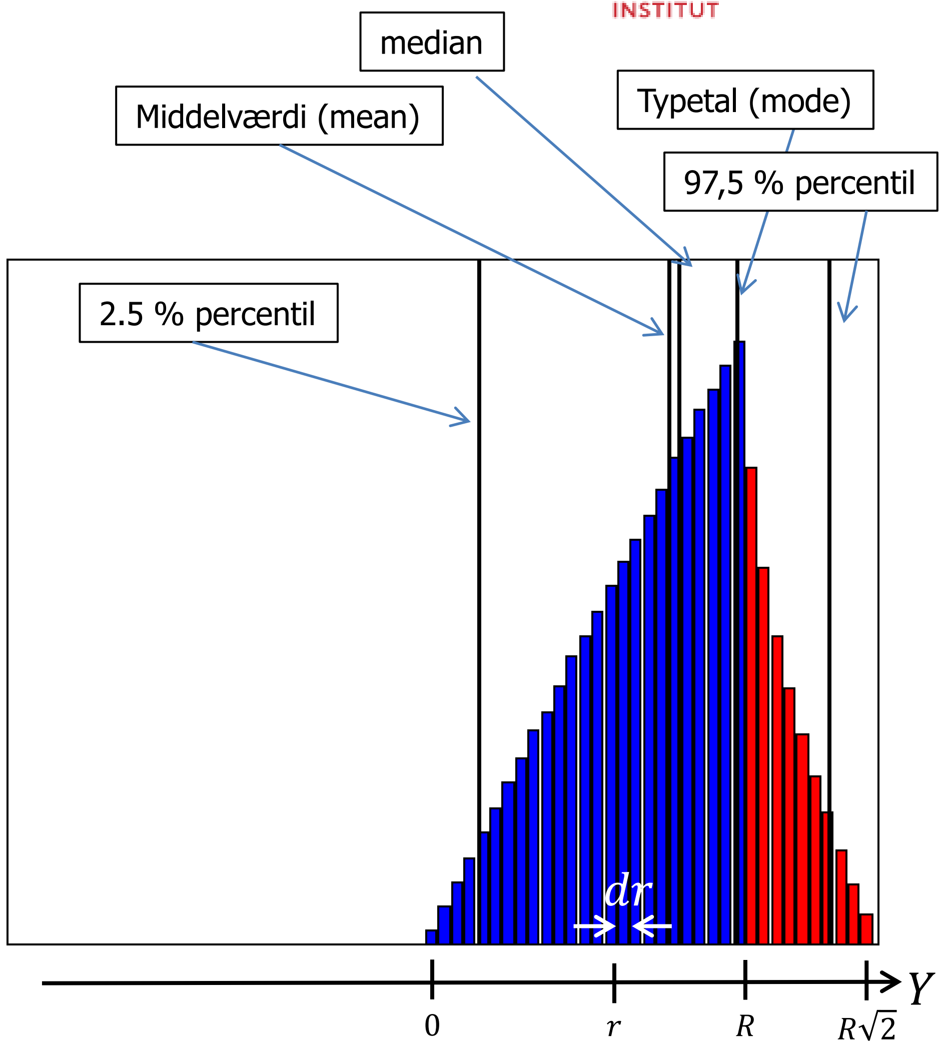
Antallet af stikprøver vs. fejl i resultatet (beregning af π*)*

MCM til usikkerhedsberegning

TEKNOLOGISK INSTITUT

- Monte Carlo-metode (——)
  - Middelværdi, median og typetal beregnes
  - Konfidensinterval beregnes (95 %)
- Hvad betyder dette?
  - Usikkerhedsfordelingen til højre giver sandsynligheden for at finde et riskorn i et kvadrat i en given afstand fra centrum.
  - Eksempel: sandsyndligheden for at finde et riskorn i det angivne bælte kan aflæses på histogrammet til højre
  - Histogrammets søjlebredde er angivet som dr





Histogram angiver sandsynligheden for at finde et riskorn i et kvadrat i en given afstand fra centrum

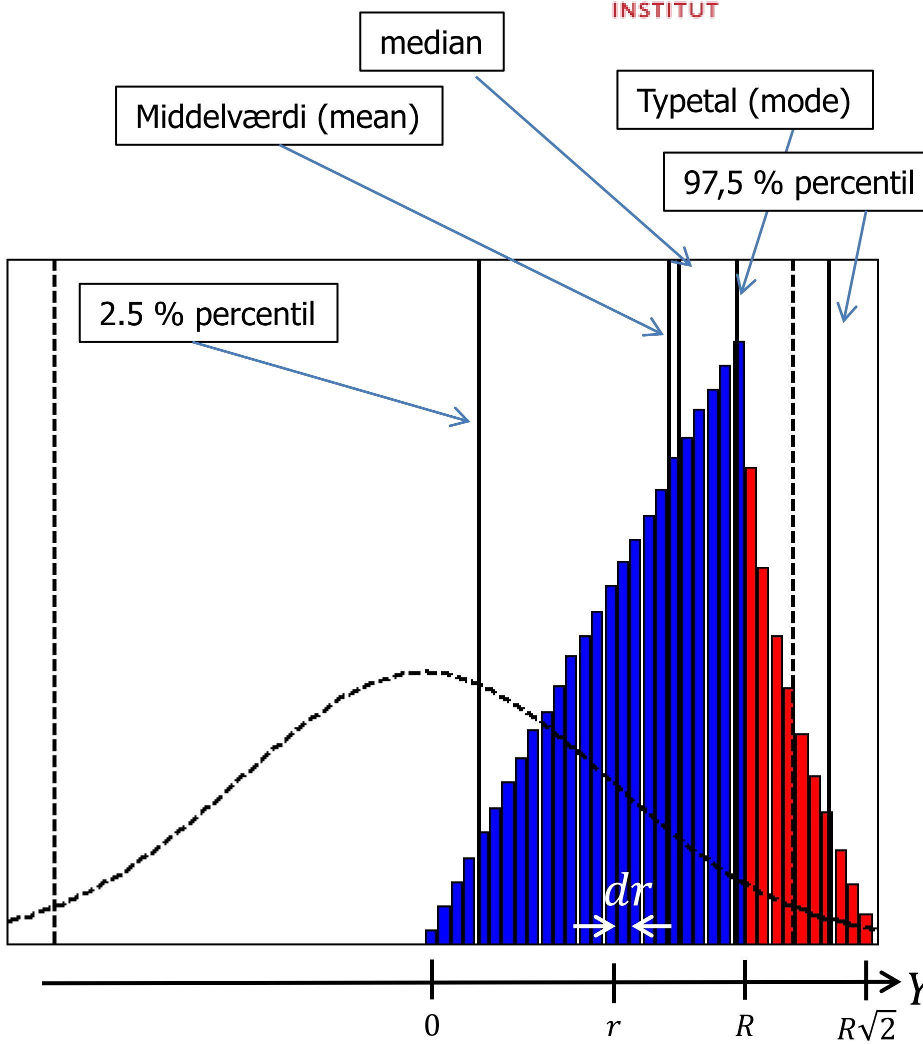
GUM til usikkerhedsberegning

- GUM–metoden (----)
  - Modelligning: $Y = \sqrt{X_1^2 + X_2^2}$
  - $u_c^2(y) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 u(x_i)^2$
  - De partielle afledte giver:
  - $u_c^2(Y) = \frac{X_1^2}{X_1^2+X_2^2} u(X_1)^2 + \frac{X_2^2}{X_1^2+X_2^2} u(X_2)^2$
  - I dette tilfælde gælder:

    $X_1 = X_2$ og $u(X_1) = u(X_2) = \frac{R}{\sqrt{3}}$
  - Ekspanderet usikkerhed kan beregnes som:

$$U = k \cdot u_c(Y) = 2 \cdot u(X_1) = 2 \cdot \frac{R}{\sqrt{3}} = 1.15 \cdot R$$

- Sammenligning GUM vs. MCM:
  - $U_{\mathrm{MCM}} = 1.27 \cdot R$
    - Dvs. GUM underestimerer "usikkerheden"
  - GUM angiver en sandsynlighed for $Y < 0$



Histogram angiver sandsynligheden for at finde et riskorn i et kvadrat i en given afstand fra centrum

Hvorfor er der forskel på GUM og MCM metoden?

TEKNOLOGISK INSTITUT

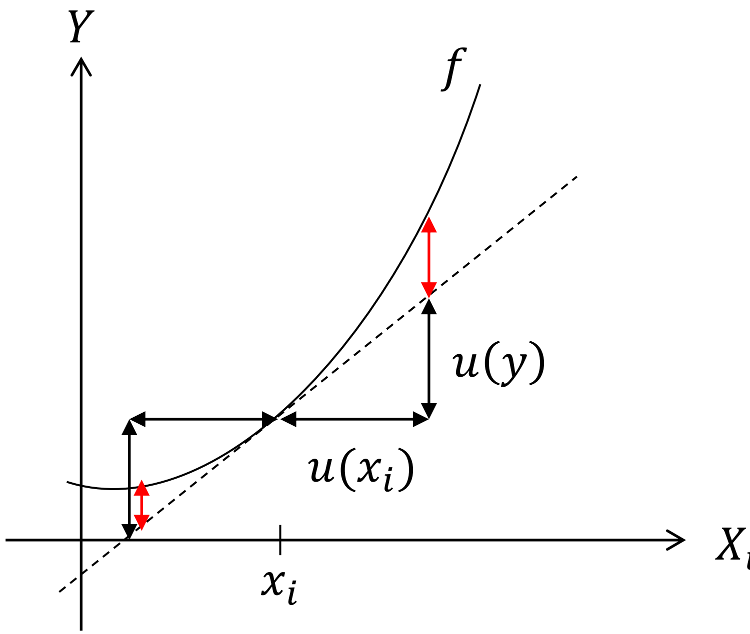
- $E(Y) = E(f[X_1, X_2]) \neq f[E(X_1), E(X_2)]$
  - Modelligningen evalueret i inputvariablernes middelværdi er generelt forskellig fra modelligningens middelværdi

- $u_c^2(y) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2 u(x_i)^2$
  - Linearisering af f
  - Beregning af ændringen i y når inputestimatet x_i ændrer sig med $u(x_i)$

- Hvis modelligningen er simpel dvs. inputvariablene:
  - Er nogenlunde ukorrelerede
  - Indgår lineært i modellen (f)

- Og hvis målestørrelsen Y er nogenlunde normalfordelt (den centrale grænseværdisætning)

- Så giver GUM-metoden ofte et tilstrækkelig godt estimat på usikkerheden



Skitseret eksempel på en ikke lineær modelfunktion og dennes afvigelse fra GUM-lineariseringen (angivet med rød pil)

GUM vs. MCM

Volumen, 100 kg vejetank

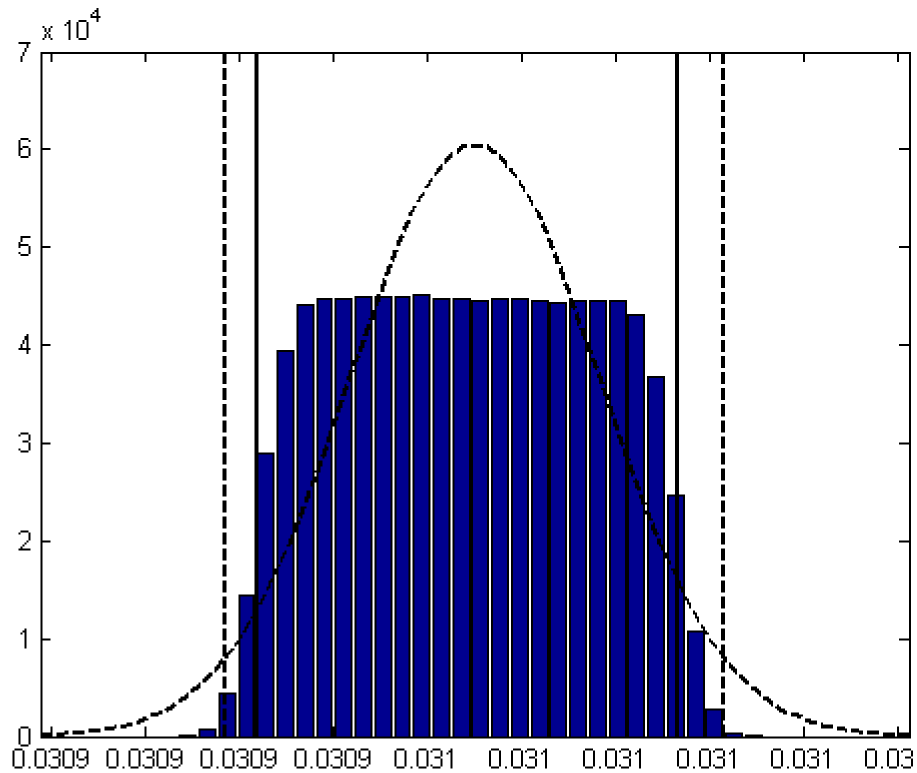
- Estimering af volumen af en nominel vandmængde på 30 kg, ved en temperatur på 80 °C afvejet på en 100 kg vejecelle
- Model-ligning består af 30 konstanter og 15 input variable, og inddrager bl.a. korrektioner og usikkerheder forårsaget af:
  - Omgivelsernes temperatur, luftfugtighed og barometerstand
  - Drift og kalibreringsusikkerhed på referencelodder
  - Vandets temperatur
  - Vægtens aflæsningsusikkerhed, gentagelsesusikkerhed, linearitet, temperaturkoefficient, langtidsstabilitet
  - Luftfigtighed i vejetank
- Beregning af usikkerhed:
  - Gå i krig med matematikken (GUM)
  - Anvende beregnings-software
    - GUM Workbench
    - Excel
  - Eller, anvend Monte Carlo-metode

$$Y = f(X_1, X_2, X_3, X_4, \dots, X_{15}; C_1, C_2, C_3, \dots, C_{30})$$

Vejetank til afvejning af op til 100 kg vand anvendes ifm. flowmåling

GUM vs. MCM
Volumen, 30 kg vejecelle

- MCM parametre
  - 10^6 samples ($N = 10^6$) per inputvariabel
  - Alle inputvariable er samplet udfra de relevante fordelinger
- MCM (m^3)
  - Y = 0.0309571
  - $\sigma = 5.55 \cdot 10^{-6}$
- GUM (m^3)
  - Y= 0.0309575
  - $\sigma = 6.59 \cdot 10^{-6}$
- Konklusion
  - GUM er 19% mere konservativ end MCM mht den beregede usikkerhed
  - Iht. JCGM 101:2008 kan GUF-metoden altså ikke valideres
  - Pga. modellens ulinearitet samt den statiske usikkerhed ifm. MCM er estimatet på Y en smule forskellig for de 2 metoder, forskellen er dog ikke signifikant

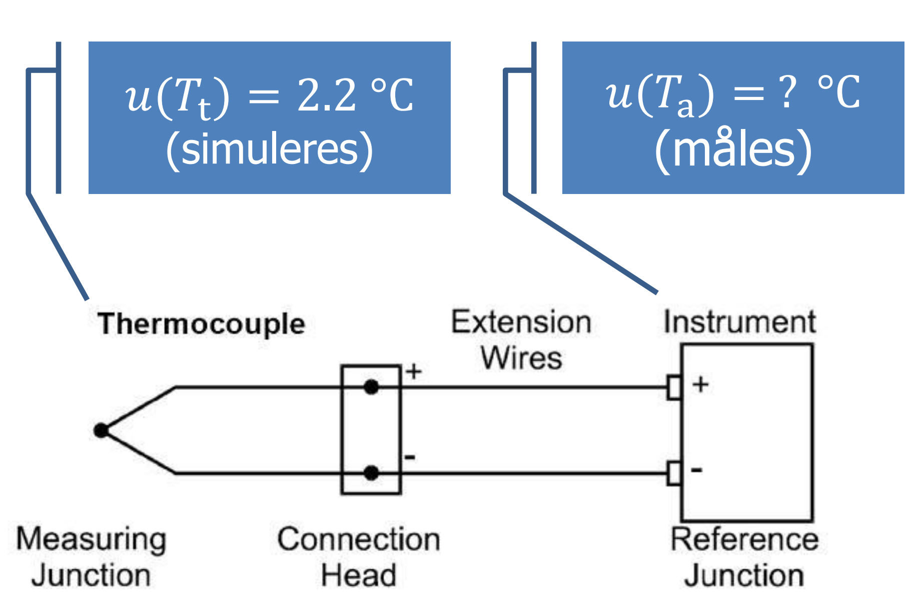


Dynamisk Monte Carlo-metode
NI LabVIEW implementering (eksempel)

TEKNOLOGISK INSTITUT

- Monte Carlo-metode implementeret som et sæt funktioner i et LabVIEW bibliotek, metoden kan dermed anvendes:
  - Direkte i dataopsamlings-softwaren
  - Til en visualisering af målestørrelsens fordeling mens man måler
  - Til estimering af målestørrelse og tilhørende usikkerhed mens man måler

- Eksempel: måling af temperatur med en type K thermocouple
  - Usikkerhed på aflæsning (bestemmes eksperimentelt)
  - Usikkerhed pga. udsving i materialesammensætning (simuleres) → angives i datablad som tolerancen
  - Modelligning:
    - $T = T_\mathrm{a} + T_\mathrm{t}$



Forsimplet skitsering af de forskellige komponenter der udgør et thermocouple målesystem

Usikkerheden beregnes iht. GUM således:

$$u(T) = \sqrt{u(T_\mathrm{a})^2 + u(T_\mathrm{t})^2} = \sqrt{u(T_\mathrm{a})^2 + \left(\frac{2.2\ °\mathrm{C}}{\sqrt{3}}\right)^2} = ?$$

Beregning af usikkerhed på regressions-parametre

TEKNOLOGISK INSTITUT

- Lineær regression (fx polynomie-regression) bygger på et velbeskrevet statistisk fundament
  - Estimat på regressionsparametre og deres usikkerheder kan bestemmes analytisk og er alle sammen veldefinerede størrelser

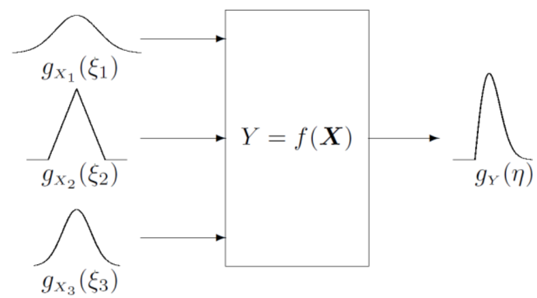
$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

Polynomisk regressionsmodel (lineær)

$$y = a_o(1 - e^{-a_1 x + a_2})$$

Exponentiel regressionsmodel (ikke lineær)

- Ikke-lineær regression udføres vha. iterativ algoritme
  - Dvs. der eksisterer ikke en "traditionel" modelligning som beskriver målestørrelsen ($Y = f(X_1, X_2, \ldots, X_n)$)
  - GUM kan dermed ikke anvendes her
  - Men det kan Monte Carlo-metoden ☺

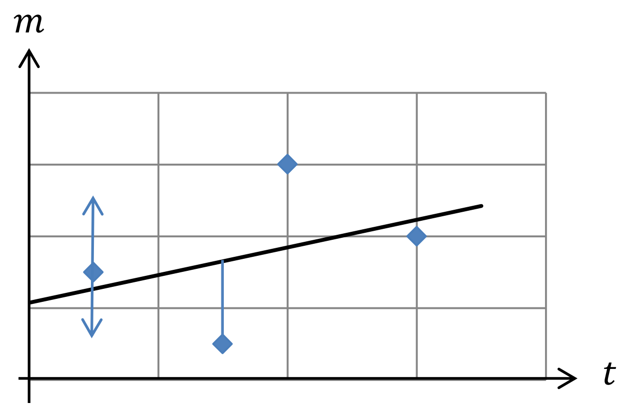


Modelligningen bestemmer hvordan inputfordelingerne propagerer og tilsammen danner den resulterende sandsynlighedsfordeling.

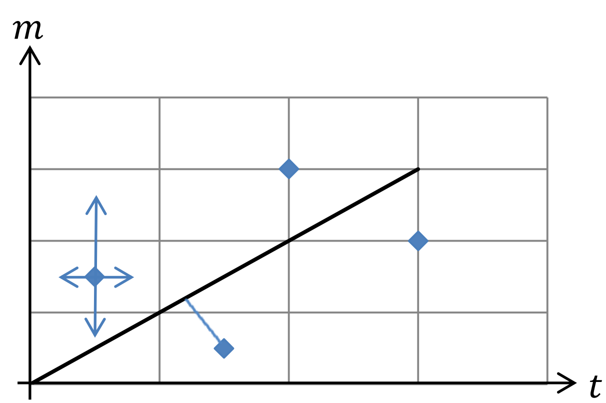
Dynamisk flow – Deming regression

- Implementeret i praksis for at validere estimaterne på regressionsusikkerheden ifm. en såkaldt Deming-regression
  - Anvendes i dataopsamlingssoftwaren på vores mikroflow setup ned til 1 µL/h
  - $Q = \frac{dV}{dt} = \frac{dm}{dt}\frac{1}{\rho}$ (flow)
  - Dvs 2 regressionsparametre med tilhørende usikkerhed (hældning og offset)
  - Usikkerhed på bestemmelse af masse, tid, og densitet

- MCM fremgangsmåde
  - Måledata opsamles
  - Hver måling af masse og tid behandles som en inputparameter X_i med en tilhørende sandsynlighedsfordeling
  - Der udtages stikprøver fra alle X_i, og for hver stikprøve udføres regressionen.
  - Regressionen giver to output variable Y_1 og Y_2 som beskriver hældning og offset og fordelingen af disse beskriver usikkerheden på disse estimater



*Mindste kvadraters metode: bedste rette linie som kun tager højde for usikkerhed i **m***

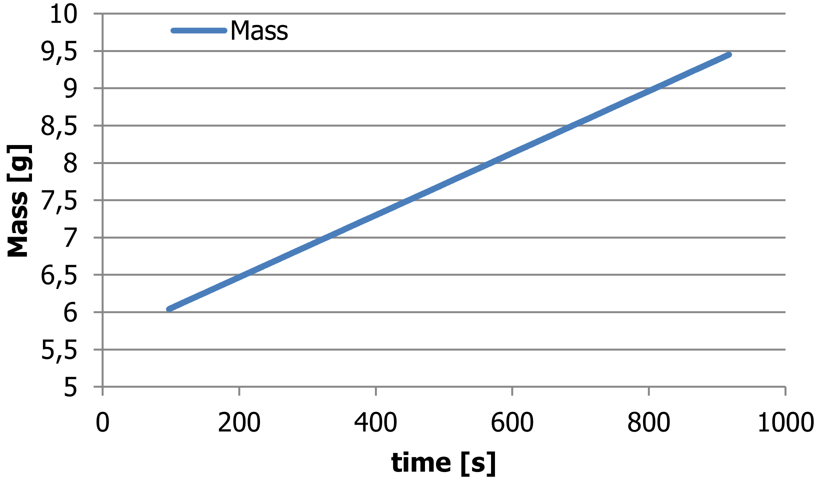


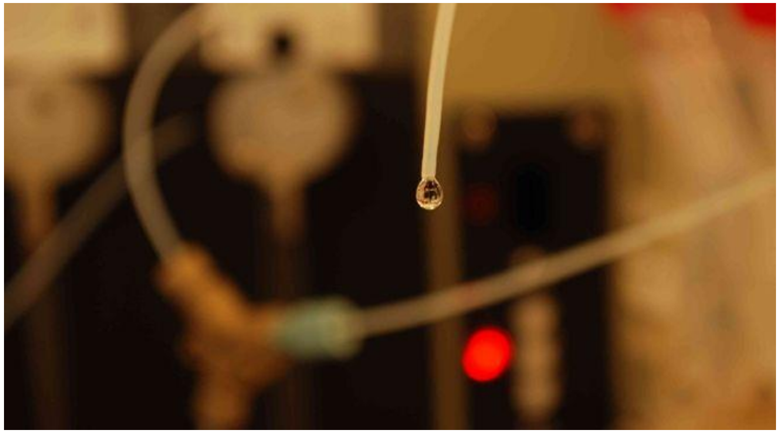
*Deming regression: bedste rette linie som tager højde for usikkerhed i både **m** og **t***

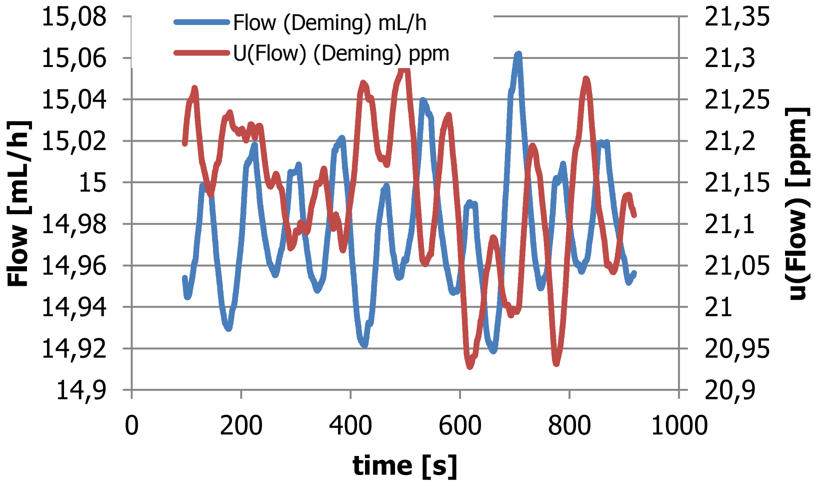
Dynamisk flow – Deming regression

- Regressionsanalyse laves mens der måles
- Dvs. flow og tilhørende usikkerhed beregnes dynamisk
- Giver fordele ift. vurdering af systemets stabilitet
- Sjældent nødvendigt at gentage de tidskrævende målinger, da datakvaliteten evalueres dynamisk.

TEKNOLOGISK INSTITUT

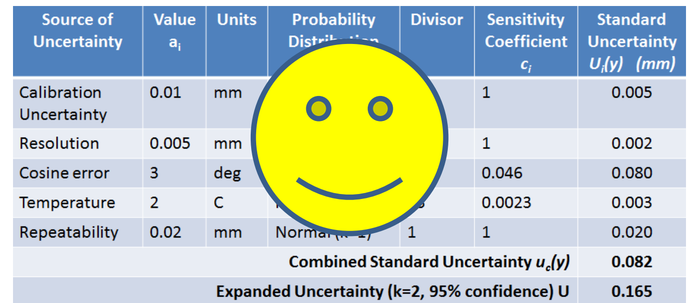




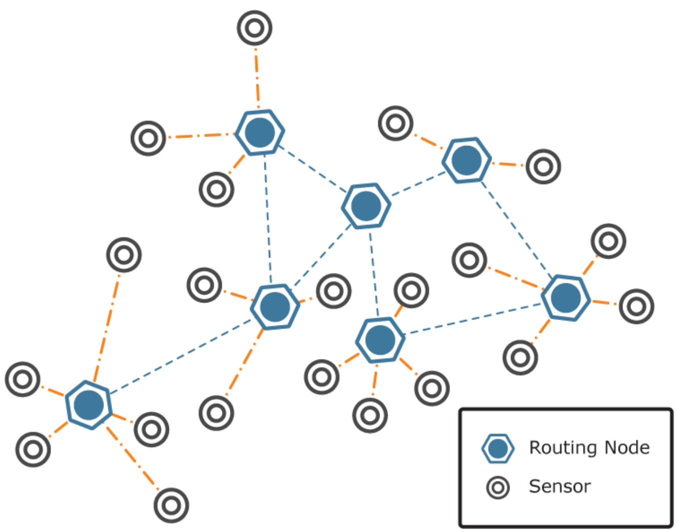


Konklusion

- MCM er mere retvisende end ”traditionelle” metoder
  - ✓ Anvendes til validering af usikkerhedsberegninger
  - ✓ Er forholdsvis ligetil at implementere
  - ✓ De anvendte statistikfunktioner er efterhånden indbygget i det meste software (fx også Excel)



Source of Uncertainty	Value a_i	Units	Probability Distri[illegible]	Divisor	Sensitivity Coefficient c_i	Standard Uncertainty $U_i(y)$ (mm)
Calibration Uncertainty	0.01	mm	[illegible]	[illegible]	1	0.005
Resolution	0.005	mm	[illegible]	[illegible]	1	0.002
Cosine error	3	deg	[illegible]	[illegible]	0.046	0.080
Temperature	2	C	[illegible]	[illegible]	0.0023	0.003
Repeatability	0.02	mm	Norma[illegible]	1	1	0.020
					Combined Standard Uncertainty $u_c(y)$	0.082
					Expanded Uncertainty (k=2, 95% confidence) U	0.165



- MCM kan anvendes på alle systemer
  - Dvs usikkerheder kan beregnes hvor den ”traditionelle” tilgang ikke er mulig
  - Og hvor der ikke eksisterer en egentlig modelligning, fx sensornetværk (analyse af smart meter data)