

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

Обзорная статья

УДК 52–17:519.254:006.91

<https://doi.org/10.20915/2077-1177-2024-20-4-89-102>



О применении Байесовского подхода к построению интервала охвата при ограничениях на значения измеряемой величины

А. В. Степанов  , А. Г. Чуновкина 

ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии
им. Д. И. Менделеева», г. Санкт-Петербург, Россия

 stepanov17@yandex.ru

Аннотация: Проблема оценивания неопределенности результатов измерений вблизи естественных границ значений измеряемых величин представляет значительный интерес для метрологов-практиков и далека от своего разрешения. В статье рассмотрен Байесовский подход к построению несимметричного интервала охвата и оцениванию неопределенности измерения в случае, когда множество возможных значений измеряемой величины ограничено. Особый интерес представляет случай, когда измеренное значение находится вблизи границы множества его возможных значений, так как построенный «традиционный» симметричный интервал, отвечающий значению коэффициента охвата, равному двум (для уровня доверия 95 %), выходит за эту границу и, как следствие, перестает обеспечивать заданный уровень доверительной вероятности.

При реализации Байесовского подхода важным исходным моментом является выбор априорной плотности распределения значений измеряемой величины. Рассмотрены четыре варианта выбора априорной плотности, включая асимметричную плотность распределения из семейства двусторонних степенных распределений (TSP), даны рекомендации по их выбору и применению в зависимости от близости априорной оценки нижней границы измеряемой величины, а также измеряемого значения, к верхней границе диапазона возможных значений, относительно величины неопределенности измерения.

Разработано программное обеспечение для оценки характеристик апостериорной плотности (математического ожидания, моды и СКО) распределений значений измеряемой величины и построения кратчайших интервалов охвата, а также для вычисления уровня доверия, соответствующего «традиционному» интервалу охвата, полученному с использованием расширенной неопределенности. Применение разработанного программного обеспечения позволяет получить полную информацию о точности измерения и сделать обоснованный выбор при представлении результата измерения. Полученные результаты могут представлять интерес для метрологов-практиков при разработке и аттестации методик измерений, обработке экспериментальных данных и представлении результатов измерений при характеристике стандартных образцов, а также для специалистов, занимающихся применением методов теории вероятностей и математической статистики в решении практических задач.

Ключевые слова: неопределенность измерения, интервал охвата, Байесовский подход, априорная плотность распределения, апостериорная плотность распределения

Ссылка при цитировании: Степанов А. В., Чуновкина А. Г. О применении Байесовского подхода к построению интервала охвата при ограничениях на значения измеряемой величины // Эталоны. Стандартные образцы. 2024. Т. 20, № 4. С. 89–102. <https://doi.org/10.20915/2077-1177-2024-20-4-89-102>.

Статья поступила в редакцию 09.07.2024; одобрена после рецензирования 12.11.2024; принята к публикации 25.12.2024.

MODERN METHODS OF ANALYSIS OF SUBSTANCES AND MATERIALS

Review Article

On the Application of the Bayesian Approach to Estimating the Coverage Interval of a Bounded Measurand

Aleksandr V. Stepanov  , Anna G. Chunovkina 

D. I. Mendeleyev Institute for Metrology, St. Petersburg, Russia
 stepanov17@yandex.ru

Abstract: The problem of estimating the measurement uncertainty near the natural measurand limits is of significant interest to practicing metrologists and is far from being resolved. The article considers the Bayesian approach to constructing an asymmetric coverage interval and estimating measurement uncertainty in the case where the set of permissible values of the measured quantity is bounded. Of particular interest is the case when the measured value is located near the boundary of the set of its permissible values, since the constructed «traditional» symmetric interval corresponding to a coverage factor value of two (for a confidence level of 95 %) goes beyond the boundaries of this set and, as a consequence, do not provide the specified level of confidence probability.

When implementing the Bayesian approach, an important starting point is the choice of a priori density distribution. Four options for choosing a prior probability density are considered, including an asymmetric distribution from the family of two-sided power distributions (TSP). Recommendations are given for their selection and application depending on the proximity of the a priori estimate of the lower limit of the measured value, as well as the measured value, to the upper limit of the range of permissible values, relative to the measurement uncertainty value.

A specialized software has been developed to estimate the posterior density characteristics (expectation, mode and standard deviation) of measurand distributions and construct the shortest coverage interval, as well as to calculate the confidence level corresponding to the «traditional» coverage interval obtained using expanded uncertainty. The use of this software allows to obtain complete information about the measurement accuracy and to make an informed choice when presenting the measurement result.

The results obtained may be of interest to practicing metrologists in the development and certification of measurement techniques, processing of experimental data and presentation of measurement results when characterizing standard samples, as well as specialists involved in the application of methods of probability theory and mathematical statistics in solving practical problems.

Keywords: measurement uncertainty, coverage interval, Bayesian approach, prior distribution density, posterior distribution density

For citation: Stepanov A. V., Chunovkina A. G. On the Application of the Bayesian approach to estimating the coverage interval of a bounded measurand. *Measurement Standards. Reference Materials*. 2024;20(4):89–102. (In Russ.). <https://doi.org/10.20915/2077-1177-2024-20-4-89-102>.

The article was submitted 09.07.2024; approved after reviewing 12.11.2024; accepted for publication 25.12.2024.

Введение

Дискурс

При характеристике стандартных образцов чистых веществ и аттестации методик измерений часто возникает ситуация, когда измеренное значение величины находится достаточно близко к естественной границе множества возможных значений этой величины. Задача оценивания неопределенности измерений вблизи естественных границ значений измеряемых величин не снята с повестки, остается предметом дискуссии. Предлагаются разные подходы к ее решению. Идеология оценивания неопределенности требует учета всей доступной информации о значениях измеряемой величины, что приводит к необходимости реализации соответствующих математических подходов.

В статье предлагается рассмотреть Байесовский подход к построению несимметричного интервала охвата и оцениванию неопределенности измерения в случае, когда множество возможных значений измеряемой величины ограничено.

Актуальное состояние

Основополагающим документом для оценивания неопределенности измерений является Руководство JCGM 100:2008¹, принятое многими международными организациями (например, МОЗМ, ИСО) и одобренное в качестве национального стандарта по оцениванию неопределенности измерений (ГОСТ 34100.3–2017)². В большинстве случаев результат измерения представляют

измеренным значением и соответствующей расширенной неопределенностью $\{x, U_{0,95}\}$ с указанием коэффициента охвата k . Представленная информация позволяет построить симметричный интервал охвата $x \pm U_{0,95}$, а также рассчитать стандартную неопределенность измерения, когда данный результат измерения используется как оценка входной ве-

личины в дальнейших задачах: $u(x) = \frac{U_{0,95}}{k}$.

Проблематика работы

Однако существуют ситуации, когда требуется построение асимметричных интервалов охвата [1, 2], например, в силу естественных ограничений на значения измеряемой величины [3, 4, 5, 6]. В частности, одной из таких задач является измерение чистоты высокочистых веществ, которые часто после соответствующих исследований и характеристики принимаются в качестве стандартных образцов и используются при реализации метрологической прослеживаемости. Известны разные подходы к решению данной задачи, в частности, в Руководстве ЕВРАХИМ / СИТАК CG 4³ и в работе [3] рассматривается классический подход построения симметричного интервала охвата и отсечения той его части, которая выходит за естественные границы значений измеряемой величины, но также упоминается и Байесовский подход к решению этой задачи, который приводит к построению несимметричного интервала охвата.

Построение несимметричных интервалов охвата не получило широкого распространения на практике. На взгляд авторов, это связано с тем, что, с одной стороны, требует

¹ JCGM 100:2008 Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement: Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 100:2008 // BIPM [website]. URL: https://www.bipm.org/documents/20126/2071204/JCGM_100_2008_E.pdf (Accessed: 07.07.2024).

² ГОСТ 34100.3–2017 Неопределенность измерения. Часть 3. Руководство по выражению неопределенности измерения.

³ Руководство ЕВРАХИМ / СИТАК CG 4. Количественное описание неопределенности в аналитических измерениях. 3-е изд. // Eurachem [Электронный ресурс]. URL: https://www.eurachem.org/images/stories/Guides/pdf/QUAM2012_P1_RU.pdf. (дата обращения: 07.07.2024).

применения дополнительной информации для построения априорной плотности распределения значений измеряемой величины и, с другой стороны, приводит к сложностям с представлением результата измерений. Кроме того, построение таких интервалов иногда может быть более трудоемким с вычислительной точки зрения.

Выбор метода

В данной работе применен Байесовский подход [7, 8, 9, 10] к построению несимметричного интервала охвата. В настоящее время Байесовские методы находят все более широкое применение в метрологии [11], что подтверждается большим количеством публикаций, посвященных разработке сертифицированных эталонных материалов, обработке данных сличений CIPM и связанных с ними степеней эквивалентности.

В качестве априорной плотности распределения рассмотрены четыре априорных плотности, включая асимметричную плотность распределения из семейства TSP [12, 13, 14, 15] (двустороннего степенного распределения, Two-Sided Power distribution). Отметим, что плотность равномерного распределения принадлежит этому семейству. Считаем, что значения измеряемой величины лежат в интервале $[0, 1]$ вблизи верхней границы, что соответствует задаче характеристики высокочистых веществ. Для апостериорной плотности распределений вычислены математическое ожидание, мода, стандартное отклонение и построен кратчайший интервал охвата. Апостериорная плотность распределения получена перемножением априорной плотности и функции правдоподобия, которая определяется на основе измеренного значения x и соответствующей стандартной неопределенности измерения u . Как правило, при этом предполагается, что измеренное значение распределено по нормальному закону $N(c, u)$:

$$f_0(x) \sim \exp \left\{ \frac{-(x-c)^2}{2u^2} \right\}.$$

Целевая установка работы

В настоящей статье акцент сделан на сравнительном анализе различных априорных плотностей и оценке их влияния на конечный

результат измерений с целью сформулировать рекомендации по выбору той или иной априорной плотности распределения.

Выбор априорной плотности будет сделан с тем условием, что она не должна приводить к существенному смещению математического ожидания апостериорной плотности распределения относительно измеренного значения и существенному изменению СКО апостериорного распределения по сравнению с неопределенностью измерения.

Предполагается, что до проведения измерений известно, что значение измеряемой величины превосходит некоторое фиксированное значение c_0 . Например, эта информация может быть предоставлена производителем чистых веществ. Также предполагается, что при построении априорной плотности распределения этой информации может быть сопоставлен определенный вес (w), например, исходя из опыта работы с конкретным производителем. Данная информация может быть использована при установлении требований к точности измерений (в частности, целесообразно за счет выбора методики измерений, при возможности,

ограничить снизу соотношение $\frac{1-c_0}{u}$).

Материалы и методы

Описание метода

Байесовский подход к вычислению интервала охвата. Мотивация для использования Байесовского подхода очевидна. На практике в качестве интервала охвата, как правило, используют симметричный интервал, полученный с использованием расширенной неопределенности

$$[x - ku, x + ku],$$

где x – измеренное значение; k – коэффициент охвата (когда уровень доверия составляет 95 %, обычно рассматривают $k_{0,95} = 2$, что соответствует случаю нормального распределения).

При этом предполагается, что измеряемая величина c распределена нормально с центром в точке x , отвечающей измеренному значению, и дисперсией u^2 , где u представляет собой неопределенность измерения (т. е. имеет распределение f_0 , указанное выше). Очевидно, что при значениях x , близких к единице (а точнее,

$x > 1 - 2u$), указанный интервал охвата приходится ограничивать («обрезать») справа (рассматривать «условно-симметричный» интервал охвата $[x - 2u, \min\{x + 2u, 1\}]$), т. к. точка $x + 2u > 1$ находится вне диапазона возможных значений измеряемой величины c и интегрирование f_0 по результирующему интервалу $[x - 2u, 1]$ дает значения, меньшие исходного уровня доверия $P_0 = 0,95$ (например, для $x = 1$, $x = 1 - u$ получим значения 0,477 и 0,819 соответственно).

Введение априорной плотности позволяет перейти от бесконечного носителя, отвечающего исходному нормальному распределению f_0 , к конечной области определения, совпадающей с отрезком $[0, 1]$, а также использовать имеющуюся дополнительную информацию.

Различные виды априорной плотности. Рассмотрим следующие варианты априорной плотности.

1. Равномерное распределение в диапазоне $[c_0, 1]$:

$$g_1(c) = \begin{cases} 0, & 0 \leq c \leq c_0, \\ (1 - c_0)^{-1}, & c_0 \leq c \leq 1 \end{cases}$$

2. Равномерное распределение в диапазоне $[c_0, 1]$, в котором сосредоточено $w \cdot 100\%$ плотности распределения; плотность в диапазоне $[0, c_0]$ зададим как степенную функцию

$$g_2(c) = \begin{cases} Kc^{p-1}, & 0 \leq c \leq c_0, \\ Kc_0^{p-1}, & c_0 \leq c \leq 1; \end{cases}$$

здесь константа $K_2 = K$ подбирается из условия нормировки плотности (интеграл по всему отрезку равен единице), параметр p – из условия присваивания веса отрезку $[c_0, 1]$:

$$\begin{cases} \frac{Kc_0^p}{p} + Kc_0^{p-1}(1 - c_0) = 1, \\ \frac{Kc_0^p}{p} = 1 - w, \end{cases}$$

откуда следует:

$$p = \frac{c_0}{1 - c_0} \frac{w}{1 - w}, K = \frac{w}{c_0^{p-1}(1 - c_0)}.$$

3. Распределение, плотность которого задается на отрезке $[0, 1]$ степенной функцией,

$$g_3(c) = pc^{p-1},$$

при этом параметр p выбирают исходя из веса w отрезка $[c_0, 1]$:

$$w = 1 - c_0^p, p = \frac{\ln(1 - w)}{\ln c_0}.$$

Недостатком указанного закона распределения можно считать то, что его мода находится в точке $c = 1$, в то время как на практике стопроцентная концентрация, как правило, недостижима.

Сгладить этот недостаток позволяет ниже следующий закон распределения.

4. Распределение, плотность которого задается на отрезке $[0, 1 - \delta]$ степенной функцией, при этом распределение на отрезке $[0, 1 - \delta, 1]$ полагаем равномерным (считаем, что в силу неопределенности не можем уточнить закон вблизи единичного значения c , при этом предлагается считать $\delta = 2u$); отрезку $[c_0, 1]$, как и раньше, присвоен вес w .

$$g_4(c) = \begin{cases} Kc^{p-1}, & 0 \leq c \leq 1 - \delta, \\ K(1 - \delta)^{p-1}, & 1 - \delta \leq c \leq 1. \end{cases}$$

Параметры $K_4 = K$ и p определяются из условий:

$$\begin{cases} \frac{K(1 - \delta)^p}{p} + K(1 - \delta)^{p-1}\delta = 1, \\ \frac{Kc_0^p}{p} = 1 - w. \end{cases}$$

т. е. $K = \frac{p(1 - w)}{c_0^p}$, а значение p находится из уравнения

$$(1 - w)(1 - \delta)^{p-1}(1 + (p - 1)\delta) - c_0^p = 0.$$

Апостериорные плотности для измеряемой величины c имеют вид:

$$f_i(c) = C_i g_i(c) \exp \left\{ \frac{-(c - x)^2}{2u^2} \right\}, i = 1, 2, 3, 4,$$

где C_i – нормирующие множители. Все распределения g_i (в том числе, первое) можно считать частными случаями асимметричного TSP-распределения [15].

Рассмотрим пример. Пусть $x = 0,9999$, $u = 0,0005$, $c_0 = 0,995$, $w = 0,75$. Построенные априорные и апостериорные плотности

приведены на рис. 1. Интервалы охвата при этом имеют вид:

i	Интервал охвата
1	[0,998 935, 1]
2	[0,998 935, 1]
3	[0,998 980, 1]
4	[0,998 950, 1].

При этом вероятность охвата для исходной f_0 близка к 58 %.

Сравнение априорных плотностей

Для сравнительного анализа применения различных априорных плотностей распределения измеряемой величины введем следующую параметризацию:

$$\alpha = \frac{1 - c_0}{u}, \beta = \frac{1 - x}{u},$$

т. е. параметры α, β характеризуют отклонения заявленного содержания вещества c_0 и его измеренного значения от 1 (100 %), отнесенные к величине неопределенности u . Используя

данную параметризацию, рассмотрим для априорных плотностей $g_i(c)$, $i = 1, 2, 3, 4$ следующие величины:

$$\delta m = \frac{x - m}{u}, \frac{u}{s}, \frac{L}{u},$$

где m, s, L –

математическое ожидание, СКО и длина интервала охвата апостериорного распределения (для уровня доверительной вероятности 95 %), задаваемого плотностью f_i . Ниже приведены графики (рис. 2–4) данных величин как функций от параметра β для некоторых фиксированных значений α, w .

Заметим, что для малых значений α априорные плотности $g_{1,2}$, очевидно, не могут быть рекомендованы к использованию, т. к. они приводят к явно аномальным значениям $\delta m, \frac{u}{s}$

при приближении значения к точке $x = c_0$, или,

что то же самое, $\beta = \alpha$ (особенно это заметно для значений w , близких к единице), в то время как для $i = 3, 4$ относительное отклонение δm невелико, а отношение $\frac{u}{s}$ ожидаемо стре-

мится к единице с ростом β . Соответствующие

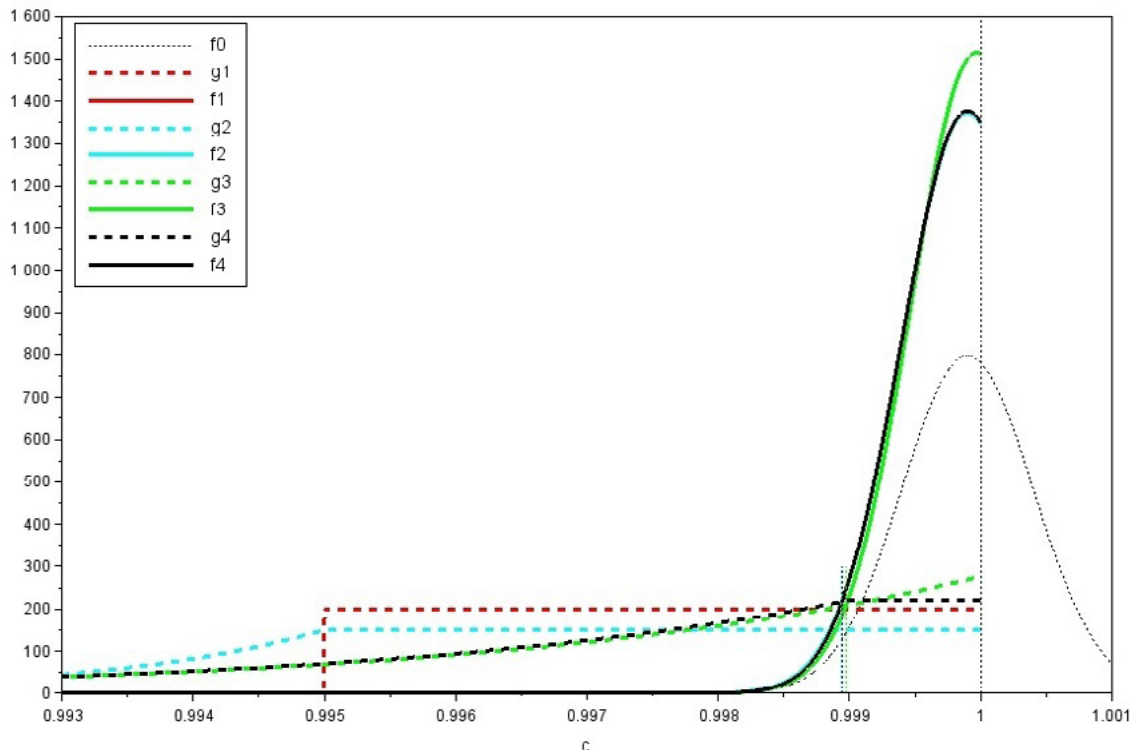


Рис. 1. Пример: априорные и апостериорные плотности распределения

Fig.1. Example: prior and posterior pdfs

графики приведены на рис. 2, 3. Также можно заметить, что при малых значениях β рассматриваемые характеристики для f_4 менее зависимы от выбора веса w по сравнению со случаем f_3 , но за это приходится «расплачиваться» большим сдвигом δm с ростом параметра β .

В то же время, для достаточно больших значений α существует достаточно длинный подынтервал отрезка $[c_0, 1]$, на котором $g_{1,2}$ обеспечивают сходные с $g_{3,4}$ характеристики, имея при этом $\delta m = 0$ (что может быть рассмотрено как их преимущество) (рис. 4).

При выборе параметра w следует принимать во внимание тот факт, что большие его значения порождают большой сдвиг δm с ростом β , поэтому не стоит выбирать значения, слишком близкие к единице (возможно, имеет смысл ограничиться диапазоном 0,75–0,95).

Вычисление интервалов охвата

Использование «традиционного» (симметричного) интервала охвата $[x - 2u, x + 2u]$ (даже после перехода к апостериорной плотности

распределения) не всегда оправдано. Во-первых, в случае $x > 1 - 2u$ его все еще приходится ограничивать единицей справа. Во-вторых, даже в случае, когда указанный интервал не приходится «обрезать», длина рассматриваемого интервала оказывается недостаточной для того, чтобы обеспечить требуемый уровень доверительной вероятности (95 % в данной работе).

Например, пусть $x = c_0 = 0,95$, $u = 0,01$ (т. е. $\alpha = \beta = 5$). Воспользуемся в данном случае плотностью f_3 (согласно рекомендации, приведенной выше). Тогда, как можно проверить, уровень доверительной вероятности для $[x - 2u, x + 2u] = [0,93, 0,97]$ составит 90,2 %. В то же время интервал охвата $[0,938, 0,977]$ (который с некоторой степенью точности можно считать кратчайшим) обеспечивает требуемый уровень доверительной вероятности. Вообще, характерной особенностью кратчайших интервалов охвата при использовании $g_{3,4}$ является их асимметрия.

Ниже (рис. 5, 6) приведены графики отношения длины кратчайшего интервала охвата L ,

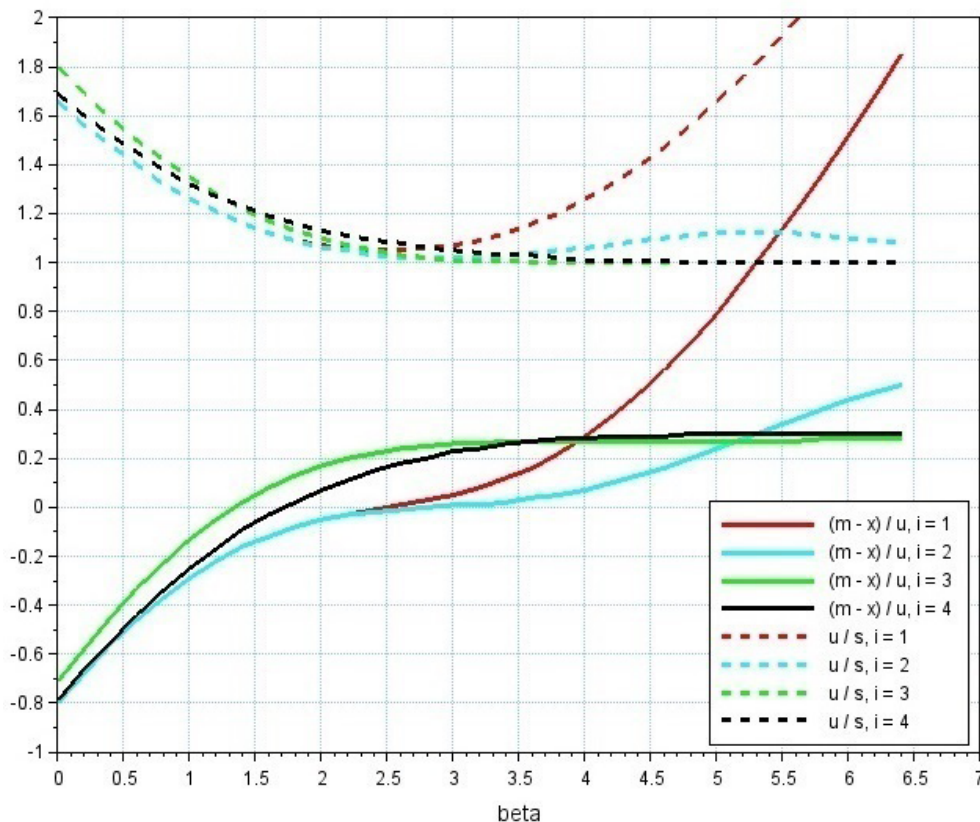


Рис. 2. Пример: графики величин δm , u/s в зависимости от β ; $\alpha = 5$, $w = 0,75$

Fig. 2. Example: graphs of δm , u/s values, depending on β ; $\alpha = 5$, $w = 0,75$

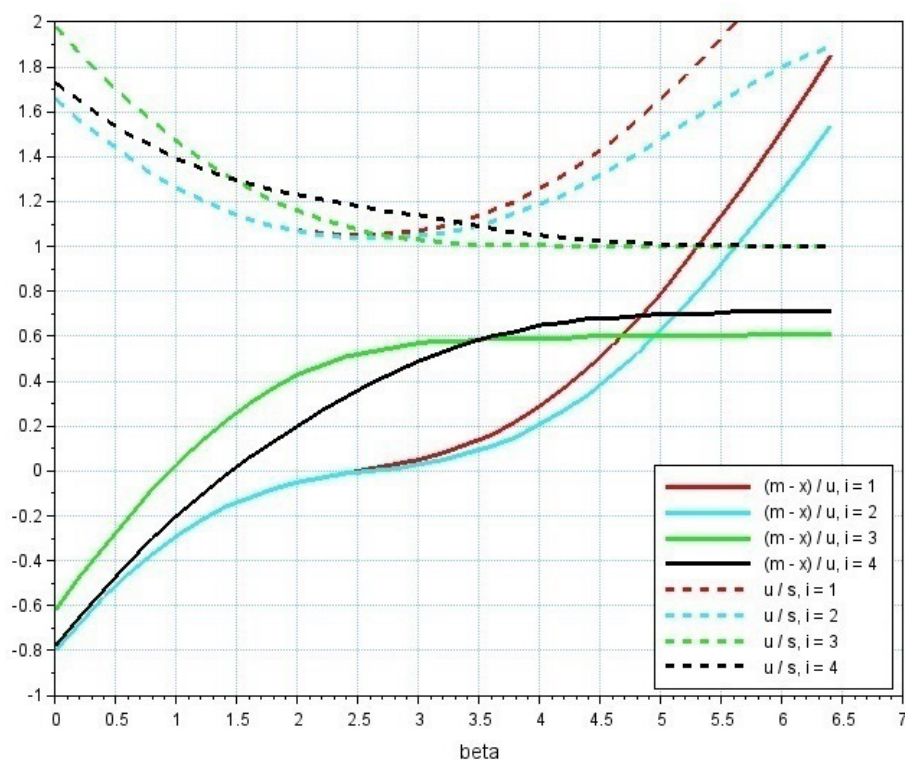


Рис. 3. Пример: графики величин δm , u/s в зависимости от β ; $\alpha=5$, $w=0.95$

Fig. 3. Example: graphs of δm , u/s values, depending on β ; $\alpha=5$, $w=0.95$

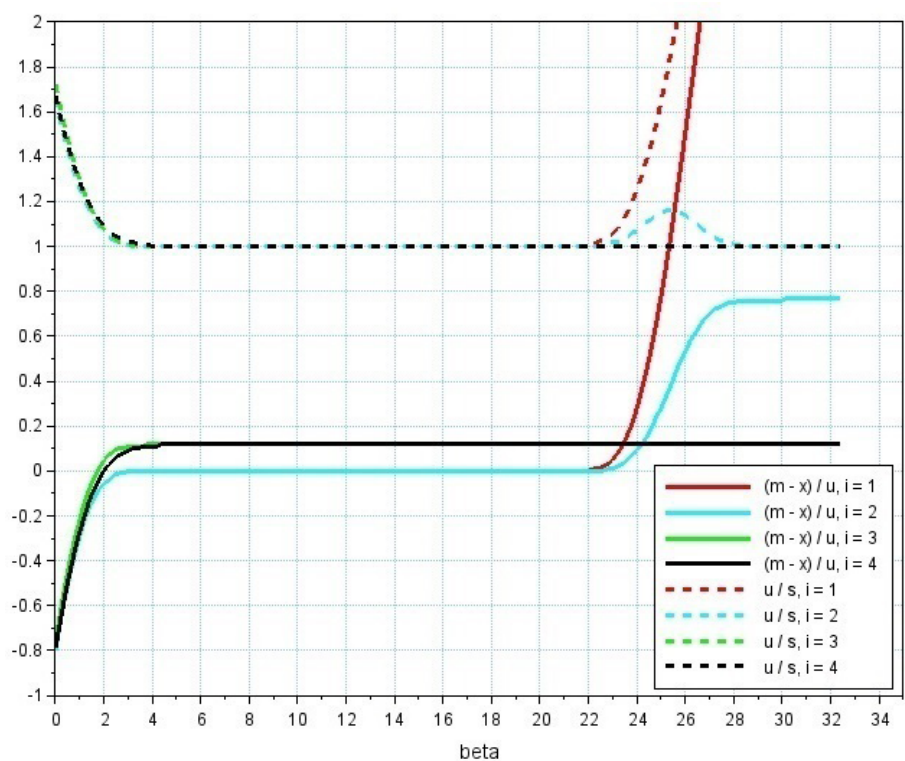


Рис. 4. Пример: графики величин δm , u/s в зависимости от β ; $\alpha=25$, $w=0.95$

Fig. 4. Example: graphs of δm , u/s values, depending on β ; $\alpha=25$, $w=0.95$

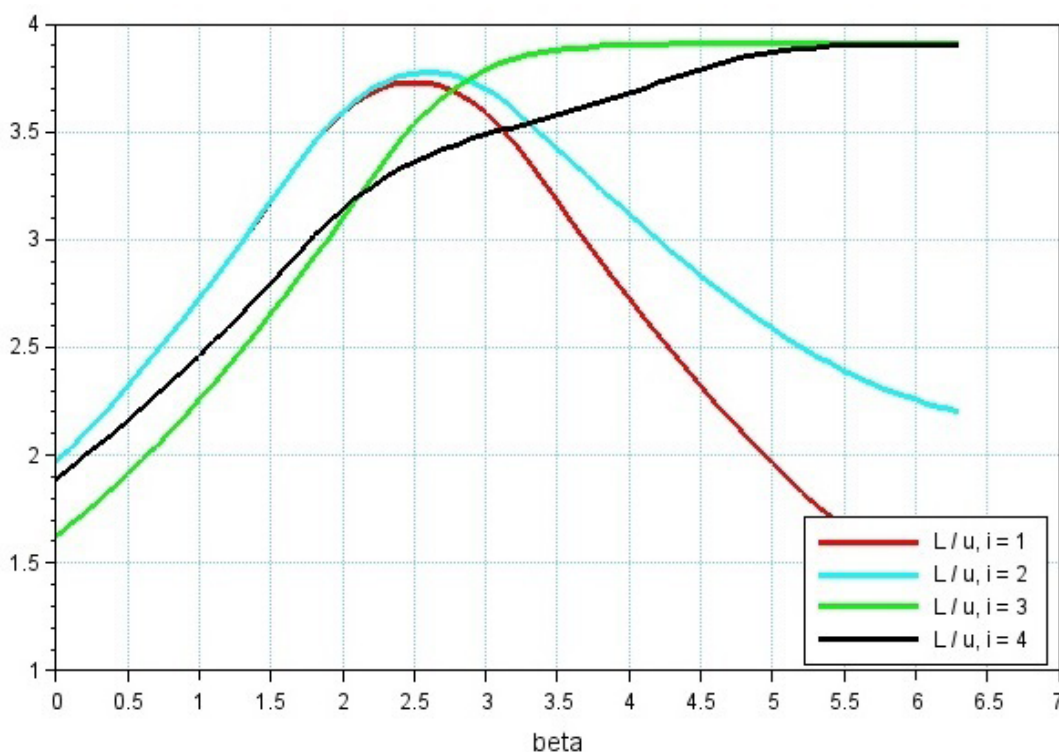


Рис. 5. Пример: графики величины L/u в зависимости от β ; $\alpha=5$, $w=0.95$

Fig. 5. Example: graphs of L/u values, depending on β ; $\alpha=5$, $w=0.95$

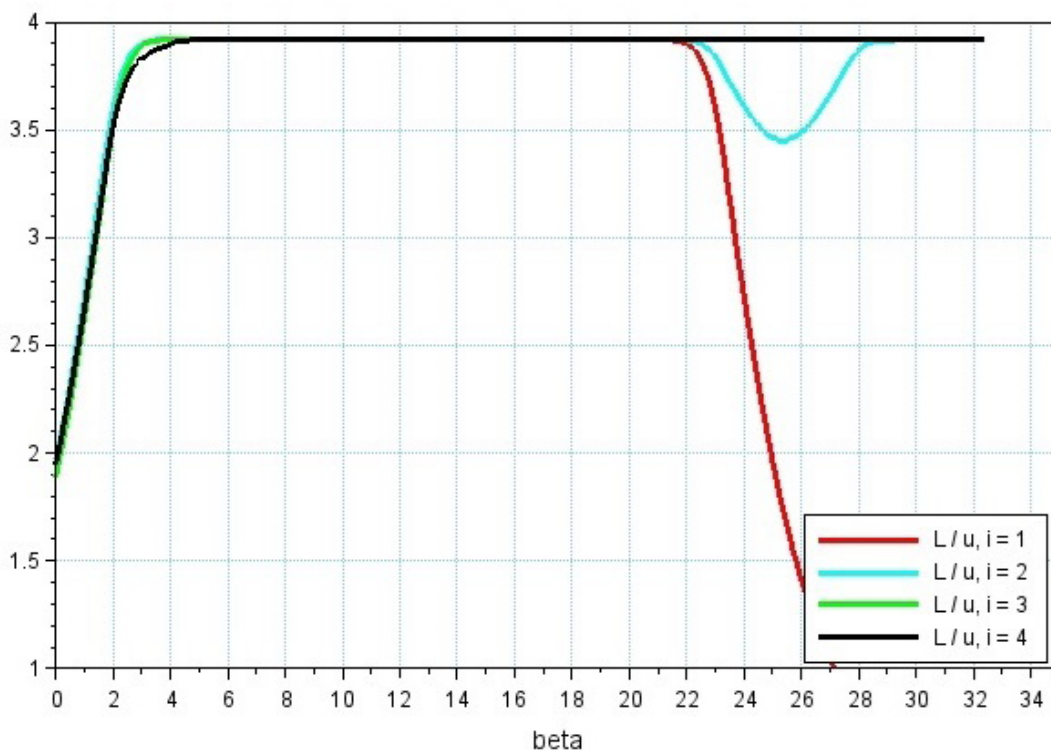


Рис. 6. Пример: графики величины L/u в зависимости от β ; $\alpha=25$, $w=0.95$

Fig. 6. Example: graphs of L/u values, depending on β ; $\alpha=25$, $w=0.95$

отнесенные к исходной неопределенности u , для рассмотренных апостериорных плотностей.

Заметим также, что интервалы охвата, полученные в случае Байесовского подхода для $g_{3,4}$, имеют сходную длину (3,92 u) для значений x , достаточно удаленных от единицы.

Результаты и обсуждение

Рекомендации по выбору априорной плотности

Таким образом, разумными представляются следующие рекомендации по выбору априорной плотности. При достаточно малых значениях параметра (например, $\alpha = 4 \dots 7$) стоит отдать предпочтение априорной плотности g_3 (g_4 , насколько это видится авторам, в целом не показала каких-то значимых преимуществ по сравнению с ней). В случае достаточно больших значений параметра α ($\alpha = 20 \dots 50$) следует выбрать априорную плотность g_1 для значений β , достаточно удаленных от α (т. е. значений x , достаточно удаленных от c_0), например, $\beta \leq \alpha - 3$. В противном случае рекомендуется воспользоваться g_3 . Априорная плотность g_2 не продемонстрировала значимых преимуществ по сравнению с g_1 , хотя ее поведение при значениях x , близких к c_0 , безусловно, является более устойчивым.

При достаточно малых α , т. е. при выборе априорных плотностей $g_{3,4}$, а также вблизи границ диапазона значений β ($\beta < 3$, $\beta > \alpha - 3$) при выборе априорной плотности g_1 интервал охвата следует перерассчитывать (по крайней мере, проверять на предмет достижения уровня доверительной вероятности 95 %). Кратчайший интервал охвата при этом (особенно в случае выбора $g_{3,4}$) может быть заметно асимметричен относительно измеренного значения. При больших α в случае выбора априорной плотности g_1 интервал охвата $[x - 2u, x + 2u]$ на достаточном удалении от границ диапазона β обеспечивает достижение заданного уровня доверительной вероятности 95 %, и кратчайший интервал отличается от него незначительно.

Для вычисления кратчайшего (и проверки корректности симметричного) интервала охвата, а также вычисления таких характеристик апостериорной функции распределения, как математическое ожидание, мода и СКО, авторами предложена несложная программа,

представляющая собой скрипт на языке программирования python⁴. Подбор априорной плотности осуществляется согласно данным выше рекомендациям. Входными данными программы являются измеренное значение x , неопределенность измерения u , априорная информация о нижней границе c_0 значения измеряемой величины и вес w , присваиваемый данной информации. Также необязательным параметром является величина коэффициента охвата для построения «традиционного» симметричного интервала охвата (можно выбрать значения 2 или 1,96; по умолчанию используется первое значение). Выходными данными являются оценки характеристик апостериорной плотности распределения (среднее, мода, СКО), которые при необходимости могут быть использованы для корректировки оценки измеренного значения и его неопределенности, кратчайший интервал охвата, симметричный интервал охвата (который обрезается в случае его выхода за границы диапазона возможных значений) и соответствующие уровни доверительной вероятности (для кратчайшего интервала охвата данное значение всегда будет равно 95 %). Пример использования программы для данных из примера выше выглядит следующим образом:

```
>>> python bayes_estimator.py
--x 0.95 --u 0.01 --c0 0.95
--w 0.95 --K 1.96
```

Вывод осуществляется в текстовом виде:

```
input data
-----
x 0.950
u 0.010
c0 0.950
w 0.950

posterior pdf
-----
mean 0.956
mode 0.956
stdev 0.010
shortest coverage interval (0.937,
```

⁴ Программное обеспечение для вычисления Байесовского интервала охвата // GitHub, Inc. [website]. URL: https://github.com/stepanov17/bayes_estimator/tree/main (дата обращения: 07.07.2024).

0.976), $P = 95.0\%$
 symmetric coverage interval
 (0.930, 0.970), $P = 90.8\%$ – invalid!
 $P < 95.0\%$

Заметим, что, как уже было показано, в данном конкретном случае уровень доверительной вероятности для симметричного интервала охвата меньше ожидаемых 95 % (программа выводит соответствующее предупреждение), поэтому вычисление кратчайшего интервала охвата (несимметричного относительно измеренного значения) является необходимым шагом.

Рекомендации по указанию результата измерения

Общие рекомендации по указанию результата измерения при измеренных значениях, близких к границе допустимых значений измеряемой величины, могли бы выглядеть следующим образом:

1. Указывать измеренное значение и расширенную неопределенность измерения, если для симметричного (с точностью до переопределения верхней границы) интервала $[x - 2u, x + 2u]$ уровень доверия близок к 95 %;

2. Указывать измеренное значение, стандартную неопределенность измерения и кратчайший интервал охвата (несимметричный относительно измеренного значения), если для симметричного интервала $[x - 2u, x + 2u]$ уровень доверия значительно отличается от 95 %.

Заметим, что работа [3] отдает предпочтение простому усечению интервала охвата по сравнению с Байесовским подходом, называя недостатком последнего сдвиг оценки измеряемой величины в случае ее пересчета на основе апостериорной плотности распределения. В данной статье авторы воздерживаются от рекомендации пересчета данной оценки (в то же время рассматривая величину δt данного сдвига и давая рекомендации по выбору априорной плотности, служащие ее минимизации). С другой стороны, следует отметить, что предложенное авторами работы [3] простое отсечение части распределения, приписываемого измеряемой величине, выходящей за границы интервала ее допустимых значений (и соответствующее усечение интервала охвата), с одновременным переносом всех «выбросов» в точку 1 производит впечатление не слишком строго

обоснованного. Применение указанного приема очевидно приводит к противоречию с изначальным предположением о непрерывном характере данного распределения (в граничной точке функция распределения терпит разрыв). Использование Байесовского подхода позволяет устранить указанный недостаток и выглядит более строгим математически.

Заключение

В работе предложен и рассмотрен метод оценивания неопределенности измерения вблизи границы интервала допустимых значений измеряемой величины на основе Байесовского подхода как один из возможных способов учета априорной информации о значениях измеряемой величины. Случай, когда измеренное значение находится вблизи естественной границы диапазона измеряемых значений, вследствие чего стандартная процедура оценивания неопределенности может приводить к некорректным результатам, достаточно распространен в метрологической практике. Тем не менее, вопрос оценки неопределенности в данной ситуации по-прежнему является дискуссионным. Результаты исследования предложенного метода с точки зрения авторов могут служить доводом в пользу применения Байесовского подхода в данном случае.

В работе акцент сделан на сравнительном исследовании разных априорных плотностей распределений, поскольку вопрос о выборе априорной плотности при реализации Байесовского подхода не является тривиальным. Одним из результатов исследований являются рекомендации по выбору априорной плотности распределения из семейства распределений TSP. Полученные результаты могут быть полезны для повышения точности оценок неопределенности при их внедрении в методики измерения и при использовании в задачах аттестации стандартных образцов и свойств материалов. Они также могут служить отправной точкой поиска решений в рамках указанной проблемы.

Для упрощения применения предложенного метода в рамках решения конкретных прикладных задач разработано ПО для оценки характеристик апостериорной плотности (математического ожидания, моды и СКО) и построения

кратчайших интервалов охвата, а также для вычисления уровня доверия, соответствующего «традиционному» интервалу охвата, полученному с использованием расширенной неопределенности. Последнее позволяет сделать обоснованный выбор при представлении результатов измерения.

Представленные в статье результаты целесообразно использовать при оценивании точности результатов измерений, в частности, при характеристике стандартных образцов чистых веществ, аттестации методик измерений. По мнению авторов, семейство распределений TSP, использованное в данной статье, может найти широкое применение в метрологии при моделировании распределений, отличных от нормального, и служить эмпирическим материалом для дальнейших исследований в области оценивания точности измерений [16].

Вклад соавторов: Степанов А. В. – математические выкладки, реализация программного обеспечения и получение конкретных результатов, выработка рекомендаций по применению, систематизация материала, работа с текстом статьи и редакция; Чуновкина А. Г. – постановка задачи исследования, разработка концепции исследования, обсуждение математических подходов и результатов, выработка рекомендаций по применению.

Contribution of the authors: Stepanov A. V. – mathematical calculations, implementation of software and obtaining specific results, development of recommendations for use, systematization of material, checking and editing the text of the article; Chunovkina A. G. – formulation of the research problem, development of the research concept, discussion of mathematical approaches and results, development of recommendations for application.

Конфликт интересов: Чуновкина А. Г. является членом редакционного совета журнала «Эталоны. Стандартные образцы». Остальные авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

Conflict of interest: Anna G. Chunovkina is a member of the editorial council of the journal «Measurement Standards. Reference Materials». The other authors declare no conflict of interest requiring disclosure in the article.

Финансирование: Это исследование не получало финансовой поддержки в виде гранта от какой-либо организации государственного, коммерческого или некоммерческого сектора.

Funding: This research did not receive financial support in the form of a grant from any governmental, for-profit, or non-profit organizations.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. *Possolo A., Merkatas C., Bodnar O.* Asymmetrical uncertainties // *Metrologia*. 2019. Vol. 56, № 4. P. 045009. <http://dx.doi.org/10.1088/1681-7575/ab2a8d>
2. *Sahlin E., Magnusson B., Svensson T.* Calculation of uncertainty intervals for skewed distributions – Application in chemical analysis with large uncertainties. RISE Report 2021:07. Gothenburg, Sweden: RISE Research Institutes of Sweden, 2021. 43 p. <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.27781.22241>
3. *Cowen S., Ellison S.* Reporting measurement uncertainty and coverage intervals near natural limits // *The Analyst*. 2006. Vol. 131, № 6. P. 710–717. <http://dx.doi.org/10.1039/B518084H>
4. *Korun M., Zorko B.* Reporting measurement results of activities near the natural limit: Note and extension of the article «Interpretation of measurement results near the detection limit in gamma-ray spectrometry using Bayesian statistics» // *Accreditation and Quality Assurance*. 2013. Vol. 18, № 3. P. 175–179. <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-013-0963-1>
5. *Wilrich P.* Note on the correction of negative measured values if the measurand is nonnegative // *Accreditation and Quality Assurance*. 2014. Vol. 19, № 2. P. 81–85. <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-013-1028-1>
6. *Wilrich P.* Note on the correction of negative measured values if the measurand is positive or 0 with known probability // *Accreditation and Quality Assurance*. 2017. Vol. 22, № 4. P. 227–232. <https://link.springer.com/article/10.1007/s00769-017-1264-x>
7. *Lira I., Grientschnig D.* Bayesian assessment of uncertainty in metrology: a tutorial // *Metrologia*. 2010. Vol. 47, № 3. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/47/3/R01>
8. *Elster C.* Bayesian uncertainty analysis compared with the application of the GUM and its supplements // *Metrologia*. 2014. Vol. 51, № 4. P. S159–S166. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/51/4/S159>

9. Chunovkina A. G., Stepanov A. V. Calculation of coverage intervals for repeated measurements (Bayesian inference) // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1065. P. 212009. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1065/21/212009>
10. Stepanov A. V., Chunovkina A. G., Burmistrova N. A. Calculation of coverage intervals: some study cases // *Advanced Mathematical and Computational Tools in Metrology and Testing X*. 2015. Vol. 86. P. 132–139. https://doi.org/10.1142/9789814678629_0015
11. Meija J., Bodnar O., Possolo A. Ode to Bayesian methods in metrology // *Metrologia*. 2023. Vol. 60, № 5. P. 052001. <http://dx.doi.org/10.1088/1681-7575/acf66b>
12. Van Dorp J. R., Kotz S. The standard two-sided power distribution and its properties // *The American Statistician*. 2002. Vol. 56, № 2. P. 90–99. <https://doi.org/10.1198/000313002317572745>
13. Kotz S., Van Dorp J. R. Beyond beta: other continuous families of distributions with bounded support and applications. World scientific publishing, 2004. 308 p. <https://doi.org/10.1142/5720>
14. Herrerias-Velasco J. M., Herrerias-Pleguezuelo R., Van Dorp J. R. The generalized two-sided power distribution // *Journal of Applied Statistics*. 2009. Vol. 36, № 5. P. 573–587. <http://dx.doi.org/10.1080/02664760802582850>
15. Stepanov A. V., Chunovkina A. G. On testing of the homogeneity of variances for two-sided power distribution family // *Accreditation and Quality Assurance*. 2023. Vol. 28. P. 129–137. <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-022-01525-8>
16. Степанов А. В., Чуновкина А. Г. Об оценке параметров асимметричного TSP распределения и его применении // Вероятностные методы в дискретной математике. 2024: тезисы докладов XI Международной Петрозаводской конференции, Петрозаводск, Карелия, 27–31 мая 2024 г. Петрозаводск : Карельский научный центр РАН, 2024. С. 106–108.

REFERENCE

1. Possolo A., Merktas C., Bodnar O. Asymmetrical uncertainties. *Metrologia*. 2019;56(4):045009. <http://dx.doi.org/10.1088/1681-7575/ab2a8d>
2. Sahlin E., Magnusson B., Svensson T. Calculation of uncertainty intervals for skewed distributions – Application in chemical analysis with large uncertainties. RISE Report 2021:07. Gothenburg, Sweden: RISE Research Institutes of Sweden; 2021. 43 p. <http://dx.doi.org/10.13140/RG.2.2.27781.22241>
3. Cowen S., Ellison S. Reporting measurement uncertainty and coverage intervals near natural limits. *The Analyst*. 2006;131(6):710–717. <http://dx.doi.org/10.1039/B518084H>
4. Korun M., Zorko B. Reporting measurement results of activities near the natural limit: Note and extension of the article «Interpretation of measurement results near the detection limit in gamma-ray spectrometry using Bayesian statistics». *Accreditation and Quality Assurance*. 2013;18(3):175–179. <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-013-0963-1>
5. Wilrich P. Note on the correction of negative measured values if the measurand is nonnegative. *Accreditation and Quality Assurance*. 2014;19(2):81–85. <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-013-1028-1>
6. Wilrich P. Note on the correction of negative measured values if the measurand is positive or 0 with known probability. *Accreditation and Quality Assurance*. 2017;22(4):227–232. <https://link.springer.com/article/10.1007/s00769-017-1264-x>
7. Lira I., Grientschnig D. Bayesian assessment of uncertainty in metrology: a tutorial. *Metrologia*. 2010;47(3). <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/47/3/R01>
8. Elster C. Bayesian uncertainty analysis compared with the application of the GUM and its supplements. *Metrologia*. 2014;51(4):S159–S166. <http://dx.doi.org/10.1088/0026-1394/51/4/S159>
9. Chunovkina A. G., Stepanov A. V. Calculation of coverage intervals for repeated measurements (Bayesian inference). *Journal of Physics: Conference Series*. 2019;1065:212009. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1065/21/212009>
10. Stepanov A. V., Chunovkina A. G., Burmistrova N. A. Calculation of coverage intervals: some study cases. *Advanced Mathematical and Computational Tools in Metrology and Testing X*. 2015;86:132–139. https://doi.org/10.1142/9789814678629_0015
11. Meija J., Bodnar O., Possolo A. Ode to Bayesian methods in metrology. *Metrologia*. 2023;60(5):052001. <http://dx.doi.org/10.1088/1681-7575/acf66b>
12. Van Dorp J. R., Kotz S. The standard two-sided power distribution and its properties. *The American Statistician*. 2002;56(2):90–99. <https://doi.org/10.1198/000313002317572745>
13. Kotz S., Van Dorp J. R. Beyond beta: other continuous families of distributions with bounded support and applications. World scientific publishing; 2004. 308 p. <https://doi.org/10.1142/5720>
14. Herrerias-Velasco J. M., Herrerias-Pleguezuelo R., Van Dorp J. R. The generalized two-sided power distribution. *Journal of Applied Statistics*. 2009;36(5):573–587. <http://dx.doi.org/10.1080/02664760802582850>
15. Stepanov A. V., Chunovkina A. G. On testing of the homogeneity of variances for two-sided power distribution family. *Accreditation and Quality Assurance*. 2023;28:129–137. <http://dx.doi.org/10.1007/s00769-022-01525-8>

16. Stepanov A. V., Chunovkina A. G. On the estimation of parameters of asymmetric TSP distribution and its application. In: Probability methods in discrete mathematics. 2024: Abstracts of reports of the XI International Petrozavodsk conference, 27–31 May 2024, Petrozavodsk, Karelia. Petrozavodsk: Karelskij nauchnyj centr RAN; 2024. P. 106–108. (In Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Степанов Александр Владимирович – канд. физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории теоретической метрологии ФГУП «ВНИИМ им. Д. И. Менделеева»

190005, Россия, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 19
e-mail: stepanov17@yandex.ru
<https://orcid.org/0000-0002-5917-1037>

Чуновкина Анна Гурьевна – д-р техн. наук, руководитель метрологического отдела ФГУП «ВНИИМ им. Д. И. Менделеева»

190005, Россия, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 19
e-mail: a.g.chunovkina@vniim.ru
<https://orcid.org/0000-0002-6222-5884>

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Aleksandr V. Stepanov – Cand. Sci. (Phys. and Mat.), leading research fellow of the Laboratory of Theoretical Metrology, D. I. Mendeleev Institute for Metrology

19 Moskovsky ave., St. Petersburg, 190005, Russia
e-mail: stepanov17@yandex.ru,
<https://orcid.org/0000-0002-5917-1037>

Anna G. Chunovkina – Doc. Sci. (Eng.), Head of the Metrology Department, D. I. Mendeleev Institute for Metrology

19 Moskovsky ave., St. Petersburg, 190005, Russia
e-mail: a.g.chunovkina@vniim.ru
<https://orcid.org/0000-0002-6222-5884>