

物理测量中的不确定度表示指南¹⁾

刘智敏

(中国计量科学研究院,北京 100013)

李化平

(北京科技大学应用物理系,北京 100083)

不确定度表示是计量工作标准化,也是科学实验中的重要问题,1980年国际计量局作出了关于实验不确定度的规定建议书 INC-1,并于1981年被国际计量委员会采纳,1986年国际计量委员会又作出决议,要求将 INC-1 用于有关工作,为了在更广泛的基础上取得统一,国际标准化组织(ISO)、国际计量委员会(CIPM)、国际法制计量组织(OIML)、国际电工委员会(IEC)共同商定成立了不确定度表示组 ISO/TAG4/WG3,并着手起草一个较详细的具有指导性的文件,以加强不确定度如何得到的完整信息和提供测量结果国际比对的基础。1989年10月工作组在西柏林召开会议,工作组、我国代表刘智敏出席了这次会议,该会议讨论了不确定度表示的详细内容并作出了建议,即《ISO/TAG4/WG3,物理测量中的不确定度表示指南》¹⁾。现介绍如下,以供参考使用。

一、基本名词和术语

1. 真值: 当被测量和测量过程完全确定,且所有测量不完善性可以排除时,由测量所获得的一个值。

2. 不确定度: 表征被测量真值所处的量值范围的评定结果,或所述值的(未知)误差可能范围的测度²⁾。

3. 标准不确定度: 表征测量结果质量的一个参数,它与统计法评定的标准差等价。

4. 移入不确定度: 辅助量采用值或校准因子中的不确定度,它不是在当前测量过程测得的或评定的,而是从外部测量或早期评定带人的不确定度。移入不确定度可以是 A 类或 B 类。

5. A 类(标准)不确定度分量: 标准不确定度的分量,它由统计法求出、推出或评出。

6. B 类(标准)不确定度分量: 标准不确定度的分量,它由不同于 A 类分量的其他方法得到。

7. A 类(标准)不确定度: A 类标准不确定度分量的全部集合。

8. B 类(标准)不确定度: B 类标准不确定度分量的全部集合。

9. 自由度: 和中分量数目减去对和的限制条件数目。

10. 合成(标准)不确定度: 受几个不确定度分量影响的测量结果的标准不确定度,它由分量的方差、协方差之和而得。

11. 范围因子: 一个数值因子,将其与合成(标准)不确定度相乘,可获得总不确定度。

12. 总不确定度: 合成不确定度乘以范围因子。因不确定度分量概率密度函数知识的缺乏,总不确定度难于附上给定的置信水平;其次,总不确定度也未提供任何新信息,故建议尽量不使用,除非为了某些实用目的的需要。

二、基本概念

测量过程的目的是提供一个或多个明确定义的物理量值的最佳估值及其不确定度的表征。对重复测量的观测变化,应认为是过程中作用于测量的全部影响量不能保持不变所致,而不是被测量的实际变化(不考虑量子力学和海森伯不确定性)。

1. 不确定度和误差

1) 由 ISO, CIPM, OIML 和 IEC 共同组织的国际不确定度表示工作组 ISO/TAG4/WG3 于 1989 年 10 月在西柏林召开了会议,并作出指导性文件《物理测量中的不确定度表示指南》,以提供用于标准化、检定、实验室和计量服务的测量不确定度的表示规则。本文主要是根据“指南”内容,并参阅有关文献摘要编译而成。

2) 测量结果不确定度不应与测量误差混淆。

为测量 y 量, 在不变额定条件下得到的一组数 (x_i) 会有变化, 各观测值的误差 $\varepsilon_i = x_i - y$. 若认为不存在偏移: $\lim \bar{x} = y$, 则一组几个测量值的平均 $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum x_i$ 就是 y 的合理估计.

若不是上述情况, 则极限实际是 $y + b$, 其中 b 是测量的偏移或“系统误差”. 这种误差性质上存在于所有数据组元素中, 来源于测量过程误差, 它可能是仪器的(检定、参考标准等)、环境的(温度、湿度、电磁场等)或理论的(模型建立, 系统知识不完善等)误差.

测量不确定度是测量质量的表述, 并表征所引用测量结果代表被测量的程度, 测量误差是被测量的真值与引用结果之差的数, 是未知的, 而不确定度则是误差可能数值(或数值可能范围)的测度.

2. 误差分布

为了描述测量结果的不确定度, 需表征其分布, 方差及更一般的方差阵, 足以表征测量过程结果的不确定度, 而无须引入测量误差的基本概率分布的附加细节. 一个无偏正态分布的期望与方差完全确定了该分布, 并可说明真值的置信区间. 在缺乏更完整信息时, 可以取正态分布, 因为它形式简单, 而且是随机变量的极限分布.

有关测量过程中所用数据(物理常数的标准值、检定曲线的参数、测量标准的采用值等)的别的误差, 给出了测量误差的固定分量, 这种误差对评定被测量误差的贡献, 不能由任何测得数据变化性观察估计出.

如有一组观测值 $x_i = x_{true} + \varepsilon_i$, 则误差 ε_i 可分解为两个分量: 一为偶然分量, 具有有限方差和零均值; 另一为偏移 b , 从一测量到另一测量它不变, 且因此具有有限均值和零方差. 由于存在偏移, 则不可能从重复测量中决定其值, 测量只能给出值 $x_{true} + b$.

偏移误差不仅不能与真值分开, 也不可能将其和偶然误差作严格区分, 因为“重复”测量(意指测量过程中所有“恒定”影响无限期地保持恒定)本身就不可能. 导致“偏移”的“恒定”

分量通常看作“系统”误差, 尽可能改变环境条件、可决定部分系统误差影响对被测量的效应, 并将其转化为已知的“修正”, 余下的系统误差就是该效应引起的不确定度.

3. 不确定度

测量过程的表示结果具有一个不确定度, 来源有二; 一是取 \bar{x} 作 $y + b$ 产生的不确定度, 另一是评定未测偏移 b 产生的不确定度. 偏移的评定是基于对测量影响因素作用的分析 and 数值的估计, 它可以是其它测量的结果, 或是基于类似测量结果知识的估计, 或基于测量仪器再现性与性能知识的估计. 对这些偏移效应的最佳值作出评定后, 测量值即已被修正, 尚存的是与偏移评定不确定度相联系的余下不确定度. 综上所述, 测量过程不确定度为: 由直接测量评定的、用统计和解析方法确定的不确定度, 及含未测量(偏移)且其估计值和不确定度需由其他间接方法获得的不确定度.

4. 不确定度评定模型

测量过程一般可模型化为函数, 该函数联系了输入量集合 (x_i) 与所有输出量 (y_k)

$$y_k = f_k(x_1, x_2, \dots, x_M), (k = 1, \dots, M) \quad (1)$$

由 x_i 的真值按 f_k 可得 y_k 的真值, 但函数可能有一未知大小的误差 δf_k , 这就给 y_k 带来系统误差. (1)式也可能是隐函数

$$F_k(x_1, \dots, x_M; y_1, \dots, y_M) = 0.$$

当 F_k 的个数大于 M , 则需要用最小二乘法等去求输出量 y_k 的最佳值.

输入量可能是:

(1) 现在直接测得的量, 相应于量仪未修正观测值(示值), 它们由重复测量得出 $\{(x_{i,j}; j = 1, \dots, n_i) \rightarrow x_i\}$.

(2) 影响量、影响系数和已知效应引起的残余误差和漂移, 它们可能是或不是重复测量结果.

(3) 其他测量的结果, 如别的操作者或在别的实验室所得测量值.

(4) 外部来源量, 如基本物理常数、手册上的值和检定值等.

5. A 类(标准)不确定度

(1) 式中输入量 x_i 常基于重复测量 x_{ij} ($j = 1, \dots, n_i$), x_i 真值的估计是算术平均

$$\bar{x}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} x_{ij} \quad (2)$$

其标准差及 A 类不确定度表征值

$$S_i(\bar{x}) = \sqrt{\frac{1}{n_i(n_i-1)} \sum_j (x_{ij} - \bar{x}_i)^2} \quad (3)$$

S_i 的可靠性用自由度说明, 实际中用有效自由度, 有效自由度数目由方差估计的方差按下面关系定义:

$$\text{Var}[S^2(Z)] = \frac{2}{\nu(Z)} [\sigma^2(Z)]^{2[2]},$$

故有

$$\nu(Z) = \frac{2}{\text{Var}[S^2(Z)]} \sigma^4(Z). \quad (4)$$

(4) 式对任何方差估计成立, 而与基本分布无关.

当按(3)式算 S_i 时, 自由度 $\nu_i = n_i - 1$; 当由 n 个测量值求 i 个待求量而采用最小二乘法时, 所得标准差的自由度为 $\nu = n - i$.

重复测量时, S 亦可由最大残差法等^[3] 算出.

当两量由相同过程测得, 它们就会相关, 则须考虑 S_1, S_2 的协方差

$$V(x_i, x_j) = r(x_i, x_j)S(x_i)S(x_j) = r_{ij}S_iS_j. \quad (5)$$

相关系数 r 应满足条件

$$-1 \leq r_{ij} \leq 1. \quad (6)$$

6. B 类(标准)不确定度

数据的统计分析不能发现固定偏移, 然而当测量集合在不同条件下重复时, 一些系统效应(即局部固定偏移, 如操作或仪器偏移, 时间引起的偏移)可以得到估计.

B 类不确定度在测量范围内无法作统计评定, 但以前类似测量的记录, 所用仪器(或类似仪器)的检定数据, 测量中所用材料和装置的一般特性和特征的知识等, 这些形成一个信息集合, 以提供评定一个不确定度的有意义的测度.

对评定 B 类不确定度最常用的估计方法, 也不能无根据的随意估计. 对 B 类所作数值估计的可靠性, 与实验人员的水平密切相关.

当测量是在相同名义条件下, 但在不同仪器、材料和环境下重复, 评定 B 类不确定度应考虑影响量的各种可能取值, 例如装置结构物质的热传导不同, 则认定的温度梯度可能变化. 虽然这种变化在测量过程中不能觉察, 但从以前的测量或制造厂家的说明书, 该量变化的别的信息可以利用.

在评定 B 类不确定度时, 也可由极限误差得到, 如用某些仪器说明书中的最大允许误差. 当已知 B 类某分量的极限误差 Δ 时, 其不确定度表征值为

$$u = \frac{\Delta}{\sqrt{3}} \quad [-\Delta, \Delta] \text{ 范围内均匀分布,}$$

$$u = \frac{\Delta}{\sqrt{2}} \quad [-\Delta, \Delta] \text{ 反正弦分布.}$$

在实际的测量工作中, 常需使仪器和量具处于理想状态, 如水平或垂直. 由于安装调整误差存在, 使实际位置偏离理想位置夹角 α , 从而给测量结果引入投影误差

$\delta = 1 - \cos \alpha$ $\alpha \sim U[-A, A]$ 均匀分布, 因 α 的最大值为 A , 由 $1 - \cos \alpha$ 的单调增长性质知 δ 的最大值 Δ 为

$$1 - \cos A = 2 \sin^2 \frac{A}{2} \\ \simeq 2 \left(\frac{A}{2}\right)^2 = \frac{A^2}{2}$$

δ 的均值(期望)为 $\frac{\Delta}{3}$, 标准差为 $\frac{3\Delta}{10}$ ^[4].

有一些不确定度, 比如与测量过程数学模型准确度相连的不确定度, 它们不能用物理特性所设分布作评定, 这或者是由于该不确定度是单个量的值(如基本自然常数), 或是由于该不确定度涉及到测量过程数学建模的精度. 对前者, 量的不确定度或者甚小而可以略去, 或者它很大, 以至测量过程足以提供该常数量值的信息, 于是测量过程可以改变公式以包含问题

中该量作为需测的输出量。

B类不确定度 u_i 的可靠性一般较差,故其自由度取 $\nu = 1$ 。

此外,指南还详细规定了“合成不确定度”,讨论了“误差传播”、“不确定度传播”、“相关和独立”等概念,详见文献[1]。

三、报告不确定度

测量结果不确定度是测量质量的描述。若无对其精密含义的一致认识和可接受的标准,不确定度表示的意义将大大降低。为使测量在实验室间及国家间的可比性增强,不确定度表示的统一和一致是很重要的,本文描述的概念提供了这一点的基础。

不仅此处提出的概念应该用于测量或测量组的不确定度评定,而且不确定度分量应详细给出,以使不确定度分析的恰当性与完整性可以判别。

直接评定(A类)和间接评定(B类)分量应分开列出,目的是为了指出不确定度的来源和性质。

对由于新数据的引入,或如结果是别的修正项目(如在基础科学研究中),在日后结果是要再独立作为分析的项目的情况下,所有检定量(以及它们的不确定度)的值的明确说明是特别重要的。

1. 测量过程的结果

测量过程的结果,即所有输出量 y_k 计算值应与其不确定度一起列出,或借助于方差阵,或借助于等价标准差(即合成不确定度) $u_{\text{eff}}(y_k)$ 和相关系数 $r(y_k, y_l)$,这与测量价值和想达到的目的有关,不确定度分量的(有效)自由度数目也应列出。

如须给出输入数据,它们也应按同一方式报告,此处重复测得量的观测数也应列出。

2. 置信水平

如 $\nu_{\text{eff}}(y)$ 足够大,人们可以足够精确引用中心极限定理,并认为 y 是渐近正态分布的,其估计方差为 $u_{\text{eff}}^2(y)$,并定义在置信水平 α 下的不确定度范围 U_α ,

$$U_\alpha = K_\alpha \sqrt{u_{\text{eff}}^2}, \quad (7)$$

K_α 的值决定于正态分布或学生分布。

用(7)式(K_α 在近似范围 $2 < K < 3$ 中选用)只是为了法制或商业原因,或由于传统的缘故,使结果有一个高概率位于区间。由于(7)式并不能给结果提供新的信息,因而这种表示意义不大。

- [1] ISO/TAG4/WG3, Guide to the Expression of Uncertainty in Physical Measurements, October (1989)
- [2] 李惕碚,实验的数字处理,科学出版社,(1981),89.
- [3] 李化平,刘智敏,物理,19(1990),233.
- [4] 刘智敏,误差与数据处理,原子能出版社,(1981) 135.

1992 年第 1 期《物理》内容预告

知识和进展

物理学与现代科学技术的关系(冯端);
扭摆的故事——简单的实验与重要的成果(葛庭燧);
量子光学的回顾和展望(郭光灿);
«90年代物理学»:原子、分子和光学物理(陆怀南编译);

心脏猝死的杀手——螺旋波(丁达夫等);
七五期间物理学方面自然科学基金的重大项目和特殊项目(国家自然科学基金委员会物理I处、物理II处)。

物理学和经济建设

物理学与新型(功能)材料专题系列介绍(1):金刚石薄

膜能成为新一代半导体材料吗?(章熙康);
声制冷和声制冷机(戴根华);
准分子激光近年应用的进展(刘大明等)。

物理学史和物理学家

亥姆霍兹的科学生涯和他对音乐物理学的开创性贡献——纪念亥姆霍兹诞辰 170 周年(张欣)。

前沿和动态

我国物理学方面论文发表情况的分析(张玉华);
中国科学院 1991 年青年学者物理学讨论会在北京举行(麦振洪);

1991 年薄膜物理与应用国际会议简讯(奚建政)。