



## Numerische Simulation

### Lernziele:

Das Konzept der Fortpflanzung von Verteilungen verstehen. Situationen in der Unsicherheitsrechnung erkennen, wo das Standard-GUM-Verfahren scheitern könnte, und bei welcher eine alternative Methode zur Ermittlung der Messunsicherheit nötig wäre.

### Inhalt

1. Einschränkungen des Standard-GUM-Verfahrens .....	1
2. Fortpflanzung der Verteilungen .....	2
3. Die Monte Carlo Methode .....	4
3.1 Zufallsgeneratoren .....	4
3.1.1 Histogramme .....	5
3.2 Linearer Kongruenz-Generator .....	6
3.3 Erzeugung von beliebigen Verteilungen .....	9
3.3.1 Allgemeine Rechteckverteilung .....	10
3.3.2 Die Methode der Umkehrtransformation .....	10
3.3.3 Die Verwerfungsmethode .....	10
3.3.4 Die Box-Müller Transformation .....	12
4. Praktische Umsetzung der Fortpflanzung von Verteilungen .....	12
4.1 Computeralgorithmus .....	13
4.2 Beispiel: das Modell $Y = X^2$ .....	15
5. Schlussbemerkungen .....	19

## 1. Einschränkungen des Standard-GUM-Verfahrens

Das Standard-GUM-Verfahren zur Ermittlung der Messunsicherheit erlaubt es, in vielen praktischen Fällen einen sinnvollen Wert  $y$  für die Messgrösse  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$  und ihrer Standardunsicherheit  $u_c(y)$  zu erhalten. Die Ermittlung einer erweiterten Unsicherheit  $U_p = k_p \cdot u_c(y)$  und die Angabe eines dem Unsicherheitsintervall zugehörigen Vertrauensgrades  $p$  kann heikler sein, da eine ausführliche Kenntnis der Verteilung  $g(y)$  der Werte von  $Y$  dazu notwendig ist. Unter gewissen Voraussetzungen ist es möglich, die Verteilung  $g(y)$  durch eine  $t$ -Verteilung anzunähern und eine effektive Anzahl der Freiheitsgraden unter Verwendung der Welch-Satterthwaite Formel  $u_c(y)$  zuzuordnen, um eine vertretbare Schätzung der erweiterten Unsicherheit  $U_p$  mit dem zugehörigen Vertrauensgrade  $p$  zu erhalten (siehe Modul MU-05).

Die Voraussetzungen zur Gültigkeit des Standard-GUM-Verfahrens sind folgende:

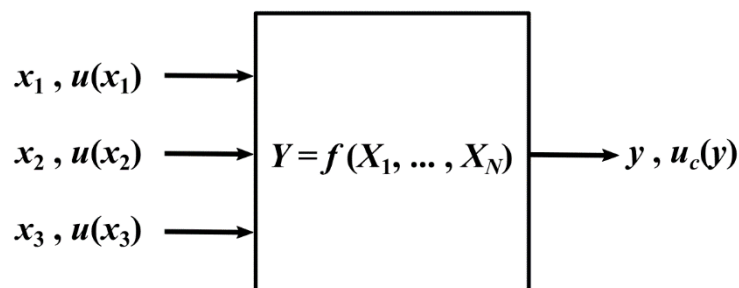
- 1) Die Funktion  $f$ , die das Messmodell darstellt, sollte keine wesentliche Nichtlinearität aufweisen.
- 2) Der zentrale Grenzwertsatz sollte anwendbar sein, so dass eine Normalverteilung oder eine  $t$ -Verteilung der Messgrösse  $Y$  zugeordnet werden kann.
- 3) Die Welch-Satterthwaite Formel zur Berechnung der effektiven Anzahl Freiheitsgrade von  $u_c(y)$  sollte anwendbar sein.
- 4) Die Eingangsvariablen  $X_i$  sollten nicht korreliert sein, wenn ihre Anzahl Freiheitsgrade  $v_i$  endlich ist.
- 5) Das Messmodell  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$  sollte nicht implizit sein, d.h. es muss möglich sein, die Ausgangsgrösse  $Y$  auf der linken Seite dieser Gleichung zu isolieren. Eine implizite Beziehung  $\tilde{f}(Y, X_1, X_2, \dots, X_N) = 0$  wäre ungeeignet.
- 6) Das Messresultat  $Y$  sollte aus einem einzigen (skalaren) Wert  $y$  bestehen, und keine Vektorgrösse  $(y_1, \dots, y_m)$  sein.
- 7) Insbesondere darf das Messresultat keine komplexe Zahl sein.

Diese Einschränkungen werden in zwei Ergänzungen zum GUM behandelt. Ergänzung 1 [1] ist in 2008 publiziert worden, und Ergänzung 2 [2] in 2011. Die erste Ergänzung betrifft Punkte 1) bis 4) der obigen Liste, und die zweite Punkte 5) bis 7).

In diesem Modul wird eine numerische Methode präsentiert, die eine Lösung liefert, wenn Punkte 1) bis 4) der obigen Liste nicht erfüllt sind.

## 2. Fortpflanzung der Verteilungen

Im Standard-GUM-Verfahren wird jede Eingangsgrösse  $X_i$  durch eine Verteilung  $g_i(x_i)$  charakterisiert, aus der ein Schätzwert  $x_i$  und die Standardunsicherheit  $u(x_i)$  gewonnen werden. Nachdem diese 2 charakteristischen Grössen bestimmt worden sind, kümmert sich das Standard-GUM-Verfahren um die genauen Verteilungen  $g_i(x_i)$  nicht mehr: nur die Schätzwerte  $x_i$  und die Standardunsicherheiten  $u(x_i)$  werden fortgepflanzt, um den Schätzwert  $y$  und die kombinierte Standardunsicherheit  $u_c(y)$  der Ausgangsgrösse  $Y$  zu gewinnen. Den ersten erhält man durch Einsetzen der Schätzwerte  $x_i$  in der Funktion  $f$ , und die lineare Unsicherheitsfortpflanzung liefert  $u_c(y)$ .



**Figur 1:** Fortpflanzung der Unsicherheiten nach dem Standard-GUM-Verfahren

Durch dieses Verfahren geht die detaillierte Information über die Verteilungen  $g_i(x_i)$  verloren, sodass die Verteilung der Ausgangsgrösse  $g(y)$  auch unbekannt ist. Von  $g(y)$  kennt man nur den Erwartungswert  $y$  und die Standardunsicherheit  $u_c(y)$ , aber nicht die zugrundeliegende Verteilung.

Die Situation kann in Fällen, bei denen die Funktion  $f$  starke Nichtlinearitäten aufweist, noch schlimmer sein: dann können die von dem Standard-GUM-Verfahren gelieferten Werte für  $y$  und  $u_c(y)$  falsch sein.

**Bemerkung:** Dieses Problem kommt daher, dass die Werte der Eingangsvariablen  $x_i$ , die in das Modell  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$  zur Berechnung von  $y$  eingefügt werden, Mittelwerte aus wiederholten Beobachtungen von  $X_i$  sind und keine einzelnen Beobachtungen von  $X_i$ . Wenn  $f$  nicht linear ist, bekommt man im Allgemeinen ein anderes Resultat für  $y$ , wenn man zunächst Mittelwerte für die  $x_i$  bildet und sie in  $f$  einfügt, als wenn man wiederholt Einzelwerte von  $x_i$  in  $f$  einfügt, um mehrere Werte  $y_j$  für  $Y$  zu erhalten, und erst dann ihren Mittelwert berechnet:  

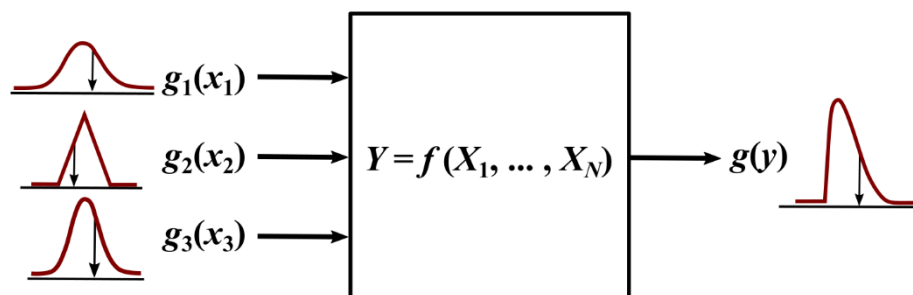
$$y = (y_1 + y_2 + \dots + y_n) / n.$$

**Beispiel:** Sei  $Y = f(X) = X^2$  (offenbar ist  $f$  nicht linear), und es werden 2 Messungen für  $X$  durchgeführt, bei denen man die Werte  $x_1 = 3$  und  $x_2 = 5$  erhält. Der Mittelwert der Eingangsgrösse ist dann  $x = 4$ . Nach dem Standard-GUM-Verfahren wird  $y = f(4) = 16$ . Wenn man zuerst  $y$  für die Einzelwerte  $x_j$  berechnet, dann erhält man  $y_1 = f(3) = 9$  und  $y_2 = f(5) = 25$ , sodass  $y = (y_1 + y_2) / 2 = 17$ .

**Bemerkung:** Mit der Forderung, dass die Funktion  $f$  keine "starken Nichtlinearitäten" aufweisen soll, wird nicht gemeint, dass sie für beliebige Werte  $x_i$  linear sein muss, sondern nur dort, wo  $X_i$  Werte annimmt, d.h. typischerweise in einem Bereich von 2 bis 3 mal der Breite der Standardunsicherheit  $u(x_i)$ .

**Beispiel:** Im obigen Beispiel wurden die Werte  $x_1 = 3$  und  $x_2 = 5$  für die Eingangsgrösse benutzt, was typische Werte für eine Verteilung  $g(x)$  mit einem Mittelwert von etwa 4 und einer Standardabweichung von etwa 1 wären. Wenn wir jetzt Eingangswerte  $x_1 = 3.9$  und  $x_2 = 4.1$  haben (typisch für eine Verteilung  $g(x)$  mit Standardabweichung von etwa 0.1), dann ist der Mittelwert wiederum  $x = 4$ . Das Standard-GUM-Verfahren liefert  $y = f(4) = 16$ , und das alternative Verfahren  $y_1 = f(3.9) = 15.21$  und  $y_2 = f(4.1) = 16.81$ , sodass  $y = (y_1 + y_2) / 2 = 16.01$ . Offenbar ist hier die Übereinstimmung der beiden Methoden viel besser. Man sieht also, dass die Funktion  $f(X) = X^2$  "stark nichtlinear" oder nur "schwach nichtlinear" sein kann, je nachdem wie gross die Standardabweichungen der Eingangsvariablen sind.

Diese Schwächen des Standard-GUM-Verfahrens können dadurch beseitigt werden, dass man die Verteilung  $g(y)$  der Ausgangsgrösse  $Y$  explizit bestimmt. Offenbar hängt sie sowohl von den Verteilungen  $g_i(x_i)$  der Eingangsgrössen  $X_i$  wie auch von der Funktion  $f$  ab. Wenn  $g(y)$  vorliegt, dann ist es einfach, alle charakteristischen Grössen des Messresultates  $Y$  auszurechnen, z.B. der Erwartungswert  $y$ , die Standardunsicherheit  $u_c(y)$ , und sogar die erweiterte Unsicherheit mit zugehörigem Vertrauensgrad  $p$  (ohne zusätzliche Näherung).



**Figur 2:** Fortpflanzung der Verteilungen

Diese Rechnung analytisch durchzuführen ist nur in einfachen Fällen möglich und in jeden Fall aufwendig. Es gibt aber die Möglichkeit, diese Rechnung numerisch durchzuführen. Die Monte Carlo Methode ist zu diesem Zweck besonders geeignet, und sie wird jetzt im nächsten Kapitel eingeführt. Die Monte Carlo Simulationstechnik entspricht einem virtuell durchgeführten Experiment, bei dem in grosser Zahl die Einflussparameter entsprechend ihrem zugrundeliegenden Verteilungsmodell variieren.

### 3. Die Monte Carlo Methode

In diesem Kapitel wird eine kleine Einführung in die Monte Carlo Methode gegeben. Der Leser, der sofort mit der Unsicherheitsfortpflanzung fortfahren möchte, kann direkt zu Kapitel 4 übergehen.

Die Monte Carlo Methode ist ein statistisches Stichprobenverfahren, das Näherungslösungen für quantitative Problemstellungen liefert. Sie ist sowohl für Problemstellungen mit intrinsisch stochastischer Struktur anwendbar (Folgeprodukt Preisbildung, Warteschlangentheorie), als auch für solche ohne probabilistische Struktur (Integralauswertung)<sup>1</sup>. Diese Methode beruht auf die Erzeugung von Zufallszahlen. Sie wurde schon im 19. Jahrhundert verwendet, und die Zufallszahlen waren damals durch Würfeln oder Kartenziehung erzeugt. Erst in den vierziger Jahren wurden statistische Stichprobenverfahren vom Polnisch-Amerikanischen Mathematiker Stanislaw Marcin Ulam systematisch untersucht. Sein Ziel war es, die Streuung der Neutronen in Materie zu simulieren im Rahmen des Manhattan-Projekts zur Entwicklung der amerikanischen Atombombe. Zusammen mit John von Neumann und Nicholas Metropolis entwickelte er die ersten Algorithmen für elektronische Rechner. Der Name "Monte Carlo" wurde nach dem berühmten Kasino von Monaco gewählt, da sich viele Zufallsgeneratoren dort befinden, wie z.B. das Roulett.

Um ein bisschen Einsicht in diese numerischen Methoden zu gewinnen, werden in den nächsten Abschnitten einige Aspekte der Zufallsgeneratoren dargelegt.

#### 3.1 Zufallsgeneratoren

Zufallszahlen sind Zahlen, die stochastisch unabhängig voneinander sind. Zufall zu definieren ist keine einfache Sache, aber man kann intuitiv sagen, dass eine Reihe von Zahlen zufällig ist, wenn keine Regel existiert, die erlaubt, die  $i$ -te Zahl in der Reihe ausgehend von der Kenntnis der  $(i-1)$  vorherigen Zahlen zu bestimmen.

Grundsätzlich bieten sich zwei Möglichkeiten zur Erzeugung von Zufallszahlen. Die eine Möglichkeit besteht in der Nutzung eines geeigneten physikalischen Experimentes, z.B. die Verarbeitung eines geeigneten elektromagnetischen Signals, oder die Zerfallszeiten der einzelnen Atome einer radioaktiven Quelle. Die andere Möglichkeit ist die Konstruktion eines Algorithmus, der eine Folge von Zahlen erzeugt. Freilich sind solche Zahlen, die von einem deterministischen Verfahren berechnet werden, keine echten Zufallszahlen, und man nennt ein solches Verfahren *Pseudo-Zufallsgenerator*. Ein guter Pseudo-Zufallsgenerator muss Zahlen erzeugen können, die "ähnlich wie Zufallszahlen aussehen". Eine ganze Sammlung von statistischen Tests wird eingesetzt, um die Qualität von Pseudo-Zufallsgeneratoren zu überprüfen, weil schlechte Generatoren zu verzerrten Resultaten der Monte Carlo Simulation führen können.

---

<sup>1</sup> Numerische Rechnungen, die auf der Verwendung von Zufallszahlen beruhen, sind oft effizienter als deterministische numerische Verfahren. Monte Carlo Algorithmen liefern Resultate, deren Konvergenzrate typischerweise wie  $k^{-1/2}$  geht, unabhängig von der Dimension des Problems, wobei  $k$  die Anzahl der erzeugten Zufallszahlen ist. Wenn man zum Beispiel ein Integral über einem Raum der Dimension  $r$  berechnen will, dann strebt das Resultat von einem stochastischen Verfahren mit  $k^{-1/2}$  gegen den exakten Wert des Integrals. Ein deterministischer Algorithmus konvergiert typischerweise mit  $k^{-1/r}$ , was für grosses  $r$  eine sehr langsame Konvergenz ist.

In der Praxis werden meistens Pseudo-Zufallsgeneratoren verwendet. Einerseits aus praktischen Gründen (man hat immer einen Computer zu Verfügung, wenn man Monte Carlo Simulation macht), und andererseits, weil physikalische Experimente manchmal unerwünschte Resultate liefern können (Korrelationen).

Grundsätzlich erlauben Pseudo-Zufallsgeneratoren ganze Zahlen auf einem endlichen Abschnitt  $\{0, 1, 2, \dots, N\}$  zu erzeugen. Ein Zufallsgenerator kann nur endlich viele unterschiedliche Zahlen erzeugen (man spricht von einer endlichen Periode), und wenn diese Periode einmal durchlaufen wurde, werden die Zahlen wiederholt. Klarerweise sind Generatoren mit kurzen Perioden nachteilig, was aber nicht impliziert, dass solche mit grossen Perioden bereits gute Generatoren sind.

Oft ist man interessiert, reelle Zahlen auf einem vorgegebenen Intervall zu erhalten, z.B. das Intervall  $[0,1]$ . Der Übergang von den ganzen Zufallszahlen zu solchen aus dem Einheitsintervall ergibt sich einfach durch dividieren der ganzen Zufallszahlen durch  $N$ , die grösste durch das Erzeugungsverfahren erzeugbare Zahl.

Pseudo-Zufallsgeneratoren liefern standardmässig Zahlen, die folgende Eigenschaften aufweisen:

- Stochastische Unabhängigkeit voneinander
- auf dem Intervall  $[0,1]$  gleichverteilt (rechteckverteilt)

Die Diskussion der Zufallsgeneratoren wird jetzt nicht allgemein weitergeführt, sondern die Erzeugung von Zufallszahlen wird im Abschnitt 3.2 anhand eines einfachen Beispiels illustriert.

### 3.1.1 Histogramme

In diesem Abschnitt wird noch daran erinnert, wie man eine Reihe von Zahlen in Histogrammform darstellen kann. Für eine ausführlichere Präsentation siehe Anhang A im Modul MU-05.

#### *Wahrscheinlichkeitsdichte*

Aus einer Liste von  $m$  Zufallszahlen kann man eine Häufigkeitsverteilung konstruieren, indem man diese Zahlen in Werteklassen einteilt. Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsverteilung  $g(x)$  erhält man dann durch dividieren der Anzahl Werte  $n_j$  in jeder Klasse durch  $n$ , was die Wahrscheinlichkeit  $p_j = (n_j / n)$ , einen Wert in der Klasse  $j$  zu bekommen, angibt. Um diese Wahrscheinlichkeitsdichte nun in Histogrammform zu zeichnen, muss man noch die  $p_j$  durch die Breite  $\Delta x_j$  der Klasse  $j$  dividieren, um die Höhe der Säule der Klasse  $j$  zu bekommen (eine Wahrscheinlichkeitsdichte gibt ja die Wahrscheinlichkeit an, einen Wert in einem Intervall  $\Delta x_j$  zu bekommen, sodass  $p_j = \text{Höhe} \times \text{Breite der Säule}$ ). Das Histogramm besteht dann aus der Nebeneinanderstellung der verschiedenen Säulen mit Höhen  $(p_j / \Delta x_j)$  und Breiten  $\Delta x_j$ .

### Verteilungsfunktion

Die Verteilungsfunktion  $G(x)$ , die die Wahrscheinlichkeit angibt, einen Wert  $x_i \leq x$  zu bekommen, erhält man dadurch, dass man die Liste der  $n$  Zufallszahlen in aufsteigender Reihenfolge ordnet<sup>2</sup>. Der Wert von  $G(x)$  für ein gegebenes  $x$  ist dann die Anzahl der  $x_i$  mit  $x_i \leq x$  dividiert durch  $n$ . Die Verteilungsfunktion kann man in Histogrammform zeichnen, indem jede Säule  $j$  die Höhe

$$\frac{1}{m} \sum_{x_i \leq x_j^{\max}} x_i$$

und die Breite  $\Delta x_j$  hat, wobei  $x_j^{\max}$  die obere Grenze der Säule  $j$  ist.

## 3.2 Linearer Kongruenz-Generator

Im linearen Kongruenz-Generator (LKG) wird die Folge der Zufallszahlen über eine (lineare) Iterationsabbildung erzeugt, die die  $(i+1)$ -te Zufallszahl ausgehend von der  $i$ -ten bestimmt:  $n_{i+1} = h(n_i)$ . Die "Zufälligkeit" der Zahlen wird durch Verwendung der "Modulo" Funktion erzeugt:  $u \bmod v$  gibt das Rest der ganzzahligen Division von  $u$  durch  $v$  an. Dieser Generator lautet

$$n_{i+1} = (a \cdot n_i + c) \bmod m \quad (3.1)$$

wobei die konstanten Parameter  $a$ ,  $c$  und  $m$  positive ganze Zahlen sind (manchmal kann  $c = 0$  sein, und man spricht dann von einem *multiplikativen Kongruenz-Generator*). Überdies wird einen Startwert  $n_0$  benötigt (English: seed). Es ist so, dass nicht jede Belegung der Grössen  $a$ ,  $c$ ,  $m$  und  $n_0$  einen zweckgerechten Zufallsgenerator sicherstellt, und es gibt eine grosse Menge Literatur zur Wahl dieser Parameter.

Offenbar sind die Zahlen, die durch den LKG (3.1) produziert werden, alle  $0 \leq n_i < m$ , sodass die Periodenlänge dieses Generators höchstens  $m$  beträgt, und dann werden die Zahlen in der gleichen Reihenfolge wiederholt. Im Falle  $c = 0$  ist die maximale Periodenlänge  $m-1$ , da  $n_i = 0$  ausgeschlossen ist (sonst sind alle nachfolgenden  $n_j = 0$  für  $j > i$ ). Aus der Folge der Zufallszahlen  $\{n_1, \dots, n_k\}$ , die im Intervall  $[0, m)$  gleichverteilt sind, kann man Zufallszahlen auf dem Einheitsintervall durch Division durch  $m$  erhalten:  $u_i = n_i / m$ .

---

<sup>2</sup> Manchmal sagt man "nicht-absteigend" anstatt "aufsteigend", um den Fall, wo verschiedene Elemente in der Liste gleiche Werte haben, zu berücksichtigen.

**Beispiel 1:** Sei der LKG

$$n_{i+1} = (2 \cdot n_i + 1) \bmod 9$$

Wählt man den Startwert  $n_0 = 1$ , dann bekommt man die folgende Reihe:

<i>i</i>	1	2	3	4	5	6	7	...
<i>n<sub>i</sub></i>	3	7	6	4	0	1	3	...

Man sieht also, dass  $n_6 = n_0$  ist, sodass die Periode dieses Generators gleich 6 ist, und dann werden die Zahlen in der gleichen Reihenfolge wiederholt:  $n_{i+6} = n_i$ .

Wählt man den Startwert  $n_0 = 2$ , dann bekommt man folgende Reihe:

<i>i</i>	1	2	3	...
<i>n<sub>i</sub></i>	5	2	5	...

Jetzt ist die Periode nur noch gleich 2.

Wählt man den Startwert  $n_0 = 8$ , dann bekommt man folgende Reihe:

<i>i</i>	1	2	...
<i>n<sub>i</sub></i>	8	8	...

Offenbar liefert diese Wahl der Koeffizienten des LKG keinen brauchbaren Zufallsgenerator<sup>3</sup>.

**Beispiel 2:** Sei der LKG

$$n_{i+1} = (31'415'821 \cdot n_i + 1) \bmod 100'000'000$$

Wählt man den Startwert  $n_0 = 0$ , dann bekommt man die folgende Reihe:

<i>i</i>	<i>n<sub>i</sub></i>
1	1
2	31'415'822
3	40'519'863

<sup>3</sup> Man kann zeigen [3], dass der LKG (3.1) die maximale Periodenlänge  $m$  hat genau dann, wenn die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:

1. Der grösste gemeinsame Teiler von  $c$  und  $m$  ist 1 (d.h., es gibt keine Zahl  $>1$ , die sowohl  $c$  wie auch  $m$  ohne Rest teilt)
2. Wenn es eine Zahl  $p$  gibt, die ein Primteiler von  $m$  ist, dann muss die Division von  $a$  durch  $p$  den Rest 1 haben (d.h.  $a \bmod p = 1$ )
3. Wenn  $m$  ein Vielfaches von 4 ist, dann muss die Division von  $a$  durch 4 den Rest 1 haben (d.h.  $a \bmod 4 = 1$ )

Für solche Generatoren, die die maximale Periodenlänge haben, ist der Wahl des Startwertes  $n_0$  nicht relevant, da alle Werte zwischen 0 und  $m$  sowieso einmal in der Sequenz vorkommen werden. Beispiel 2 zeigt, dass ein Generator, der die maximale Periodenlänge aufweist, nicht unbedingt ein guter Generator ist.

4	62'952'524
5	25'482'205
6	90'956'306
7	70'506'227
8	6'817'368
9	12'779'129
10	29'199'910
11	45'776'111
...	...

Auf den ersten Blick sehen diese Zahlen "zufällig" genug aus, aber wenn man ihre letzte Ziffer beobachtet, dann bemerkt man, dass sie die Reihenfolge 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 0, 1, ... bilden. Somit ist dieser Generator sicher nicht ideal.

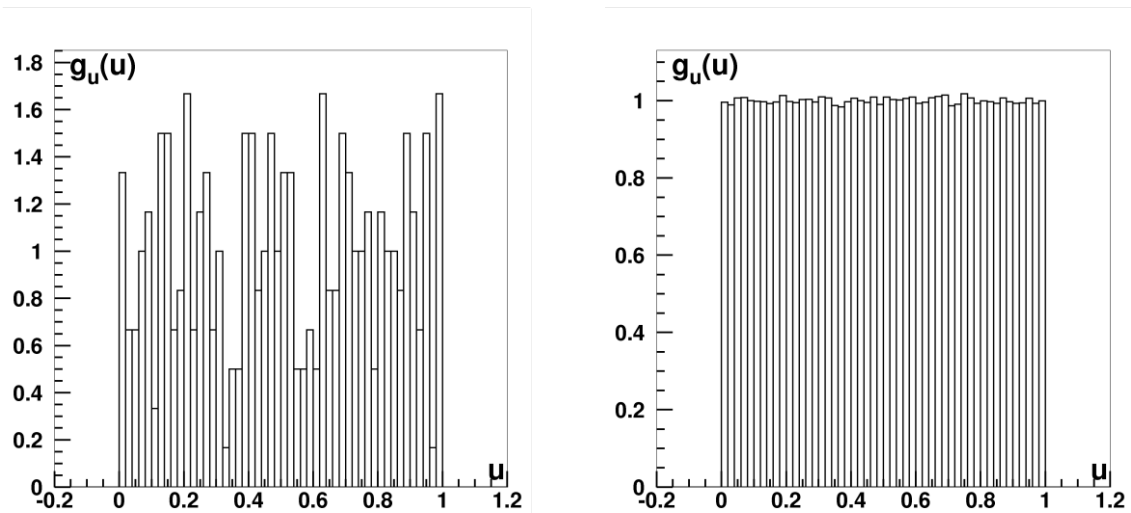
### Beispiel 3: "Park-Miller" [4] LKG

$$n_{i+1} = (16'807 \cdot n_i) \bmod 2'147'483'647$$

( $m$  ist die Primzahl  $2^{31}-1 = 2'147'483'647$ ). Wählt man den Startwert  $n_0 = 12'345$ , dann bekommt man die folgende Reihe (in der letzten Spalte sind die entsprechenden, auf dem Einheitsintervall  $[0,1]$  gleichmässig verteilten Zahlen gegeben):

$i$	$n_i$	$u_i = n_i / m$
1	207'482'415	0.096616528...
2	1'790'989'824	0.833994627...
3	2'035'175'616	0.947702497...
4	77'048'696	0.035878594...
5	24'794'531	0.011545853...
6	109'854'999	0.051155220...
7	1'644'515'420	0.765787167...
8	1'256'127'050	0.584929739...
9	1'963'079'340	0.914130052...
10	1'683'198'519	0.783800389...
11	715'426'902	0.333146612...
...	...	...





**Figur 3:** Histogramme der Rechteckverteilung eines Park-Miller LKG. Links wurden 300 Zahlen erzeugt, und rechts  $10^6$  Zahlen, um diese Wahrscheinlichkeitsdichte zu bekommen. Man sieht also, dass eine grosse Anzahl Zufallszahlen notwendig ist, um eine Verteilung genügend gut anzunähern.

Dieser Generator hat (fast) alle erwünschten Eigenschaften, aber seine Periodenlänge  $2^{31}-2 = 2'147'483'646 \approx 2 \cdot 10^9$  ist für vielen Anwendungen zu kurz<sup>4</sup>.

Allgemein ist die Wahl eines Zufallsgenerators kompliziert, und es gibt Computersysteme und Rechenprogramme, die Generatoren anbieten, die für vielen Anwendungen nicht geeignet sind. Einige Zufallsgeneratoren werden in [1] empfohlen, wie z.B. der Mersenne Twister Generator, der im Rechenprogramm MATLAB implementiert ist, oder der erweiterte Wichmann-Hill Generator, der im Wesentlichen aus einer Kombination von 4 LKG besteht, und eine Periodenlänge von  $2^{121} \approx 2.6 \cdot 10^{36}$  aufweist, was für alle praktischen Zwecke völlig ausreichend ist.

### 3.3 Erzeugung von beliebigen Verteilungen

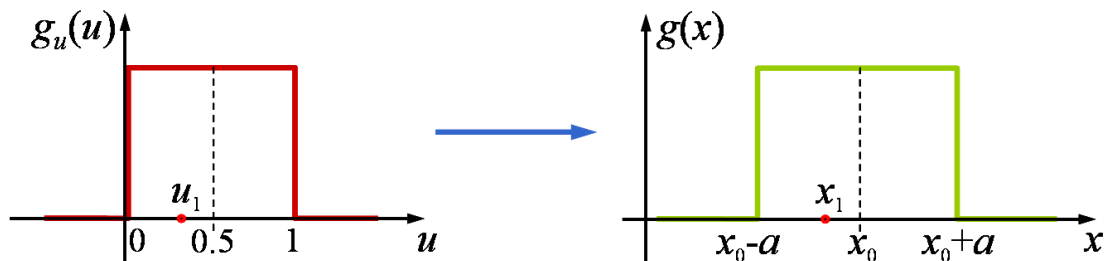
Oft benötigt man andere Verteilungen als Rechteckverteilungen. Das allgemeine Vorgehen besteht darin, zunächst rechteckverteilte Zahlen  $u_i$  zu erzeugen (siehe oben), und dann diese Zahlen durch ein geeignetes Verfahren in Zahlen  $x_i = f(u_i)$ , die die gewünschte Verteilung haben, umzurechnen. Die Wahl des Verfahrens hängt von der gewünschten Verteilung ab. Hier werden vier Beispiele gegeben, und weitere findet man dazu in [1].

<sup>4</sup> Bemerkung: Generatoren, die ganze Zahlen grösser als  $2^{32}$  erzeugen (auch in den Zwischenrechnungen!) müssen auf 32-Bit Computern korrekt programmiert werden, sonst treten Fehler auf.

### 3.3.1 Allgemeine Rechteckverteilung

Um eine Rechteckverteilung mit Mittelwert  $x_0$  und totaler Breite  $2a$  zu bekommen, genügt es, gleichverteilte Werte  $u \in [0,1)$  zu erzeugen ( $u$  ist also rechteckverteilt mit Mittelwert 0.5 und totale Breite 1.0), und dann

$$x = (u - 0.5) \cdot 2a + x_0$$



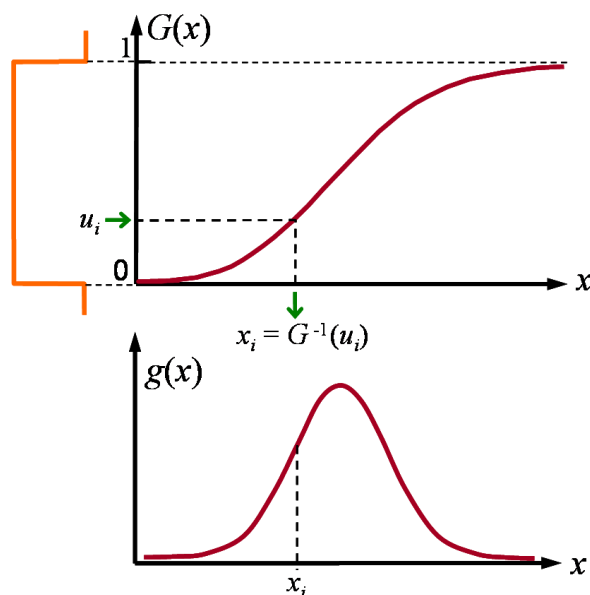
Figur 4: Allgemeine Rechteckverteilung

### 3.3.2 Die Methode der Umkehrtransformation

Die Verteilungsfunktion  $G(x)$  einer beliebigen Wahrscheinlichkeitsdichte  $g(x)$  nimmt Werte  $0 \leq G(x) < 1$  an, die im Intervall  $[0,1)$  gleichverteilt sind:

$$u = G(x) = \int_{-\infty}^x g(t) \cdot dt$$

Man kann also die Umkehrfunktion von  $G(x)$  benutzen,  $x = G^{-1}(u)$ , um ausgehend von gleichverteilten Werten  $u \in [0,1)$ , Zufallszahlen  $x$ , die der Verteilung  $g(x)$  folgen, zu bekommen.



Figur 5: Methode der Umkehrtransformation

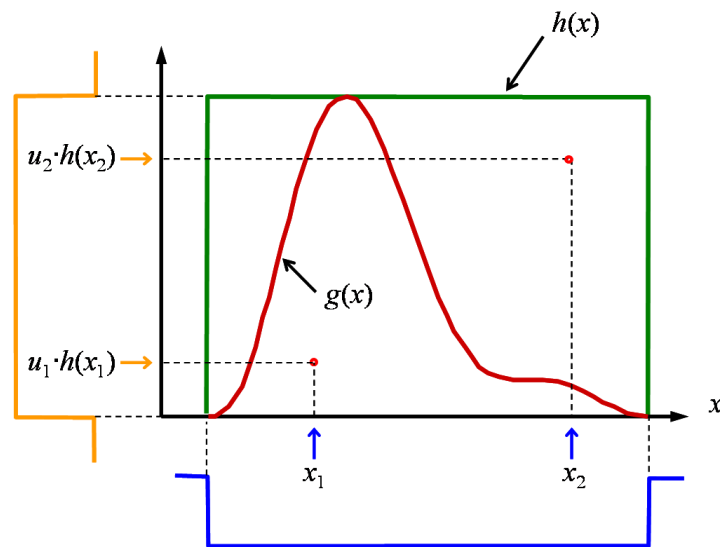
Dieses Verfahren hat den Vorteil, dass es für viele verschiedene Verteilungen anwendbar ist. Oft aber ist es nicht möglich, die Umkehrfunktion der Verteilungsfunktion  $G(x)$  explizit zu berechnen, und dann muss man eine andere Methode verwenden.

### 3.3.3 Die Verwerfungsmethode

Diese Methode ist sehr vielseitig, da sie auch für Verteilungen anwendbar ist, für die kein analytischer Ausdruck  $g(x)$  vorliegt. Zum Beispiel kann sie für ein Histogramm einer experi-

mentell bestimmten Häufigkeitsverteilung verwendet werden. Sie wird folgendermassen durchgeführt:

- 1) Zeichne eine einfach zu parametrisierende Form  $h(x)$ , die die Verteilung  $g(x)$  umgibt, z.B. ein Rechteck.
- 2) Erzeuge eine Zufallszahl  $x$  nach der Verteilung  $h(x)$ .
- 3) Berechne  $g(x)$  und  $h(x)$ .
- 4) Erzeuge eine gleichverteilte Zufallszahl  $u \in [0,1)$ .
- 5) Überprüfe, ob  $u \cdot h(x) \leq g(x)$ . Wenn ja, dann wird  $x$  angenommen, sonst wird er verworfen.
- 6) Wiederhole Punkte 2) bis 5) so oft wie nötig, um genügend viele Zufallszahlen  $x$  anzusammeln. Die so erzeugten  $x$ -Werte sind nach  $g(x)$  verteilt.



**Figur 6:** Die Verwerfungsmethode: hier wäre die Zahl  $x_1$  akzeptiert und  $x_2$  verworfen.

Offenbar ist dieses Verfahren nur für Verteilungen  $g(x)$ , die Werte ungleich Null auf einem endlichen Intervall annehmen, geeignet. Eine Normalverteilung, die positive Werte von  $-\infty$  bis  $+\infty$  annimmt, kann durch dieses Verfahren nicht erzeugt werden. Zudem ist diese Methode nicht sehr effizient, insbesondere wenn die Form  $h(x)$  eine viel grössere Fläche als  $g(x)$  einschliesst, da viele  $x$  dann verworfen werden.

### 3.3.4 Die Box-Müller Transformation

Für viele Verteilungen  $g(x)$  gibt es spezifische analytische Formeln, die es erlauben, ausgehend von gleichverteilten Zufallszahlen  $u \in [0,1)$  Zufallszahlen nach  $g(x)$  zu erzeugen. Beispielsweise lässt sich mit der Box-Müller Transformation eine Normalverteilung erzeugen:

1) Erzeuge 2 gleichverteilte Zufallszahlen<sup>5</sup>  $u_1 \in (0,1]$  und  $u_2 \in [0,1)$ .

2) Berechne die Zahlen  $z_1, z_2$  als

$$z_1 = \sqrt{-2 \cdot \ln(u_1)} \cdot \cos(2\pi \cdot u_2)$$

$$z_2 = \sqrt{-2 \cdot \ln(u_1)} \cdot \sin(2\pi \cdot u_2)$$

Die so erhaltenen Zufallszahlen  $z_1, z_2$  sind 2 unabhängige, normalverteilte Zahlen  $N(0,1)$  mit Mittelwert 0 und Varianz 1.

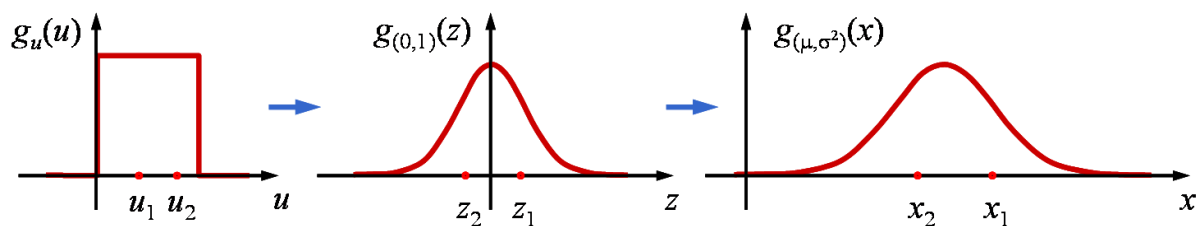
3) Berechne die Zahlen  $x_1, x_2$  als

$$x_1 = \mu + \sigma \cdot z_1$$

$$x_2 = \mu + \sigma \cdot z_2$$

Die so erhaltenen Zufallszahlen  $x_1, x_2$  sind 2 unabhängige, normalverteilte Zahlen  $N(\mu, \sigma^2)$  mit Mittelwert  $\mu$  und Varianz  $\sigma^2$ .

4) Wiederhole Punkte 1) bis 3) so oft wie nötig, um genügend viele Zufallszahlen anzusammeln.



Figur 7: Die Box-Müller Transformation

## 4. Praktische Umsetzung der Fortpflanzung von Verteilungen

Die ersten Schritte zur Ermittlung der Messunsicherheit unter Verwendung der Monte Carlo Methode sind identisch mit denjenigen des Standard-GUM-Verfahrens:

1. Definiere die resultierende Messgrösse (Ausgangsgrösse)  $Y$ .
2. Bestimme die Eingangsgrössen  $X_i$ , einschliesslich aller Korrekturen, die eine wesentliche Komponente zur Unsicherheit des Messergebnisses darstellen.
3. Entwickle eine Beziehung  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$  zwischen der Messgrösse  $Y$  und den Eingangsgrössen  $X_i$ .

---

<sup>5</sup>  $u_1$  wird ein Argument der  $\log()$  Funktion und darf nicht Null sein. Man kann einfach  $u_1 = 1 - u_1'$  setzen, wobei  $u_1' \in [0,1)$ .

Während im Standard-GUM-Verfahren der Schätzwert  $x_i$  der Eingangsgrösse  $X_i$  und die Standardabweichung  $u(x_i)$  ermittelt wird (nach Methode A oder B), muss für die Monte Carlo Methode jeder Eingangsgrösse  $X_i$  eine Verteilung zugeordnet werden, welche die  $x_i$ -Werte beschreibt. Es wird also mehr Information als beim Standard-GUM-Verfahren benötigt. Dieser Schritt ist wichtig, und man kann z.B. in [1] eine Liste von Verteilungen für typische Einflussgrössen finden. Es geht dann wie folgt weiter:

4. Ordne jeder Eingangsgrösse  $X_i$  eine Verteilung  $g_i(x_i)$  zu, welche die Werte  $x_i$  beschreibt. Man stütze sich dazu auf die verfügbare Information.
5. Durch Fortpflanzung der Verteilungen  $g_i(x_i)$  durch die Modellfunktion  $f$  hindurch erhält man die Verteilung  $g(y)$  der Ausgangsgrösse  $Y$ . Das ist der numerische Teil, bei dem die Erzeugung der Zufallszahlen benötigt wird.
6. Aus  $g(y)$  berechne den Erwartungswert  $y$ .
7. Aus  $g(y)$  berechne die Standardabweichung  $u_c(y)$ .
8. Aus  $g(y)$  berechne die erweiterte Unsicherheit, die einem vorgegebenen Grad des Vertrauens  $p$  entspricht.

Bemerkung: In der Praxis wird die Verteilungsfunktion  $G(y)$  konstruiert. Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $g(y)$  erhält man dann aus  $G(y)$ .

## 4.1 Computeralgorithmus

Hier werden nur die Hauptschritte der Monte Carlo Rechnungen angegeben. Für Details und Probleme, die bei diesem Verfahren auftreten können, wird auf [1] verwiesen.

Wir nehmen an, dass die Beziehung  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$  und die Verteilungen  $g_i(x_i)$  der Eingangsgrössen  $X_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  festgelegt seien. Punkte 5) bis 8) der obigen Liste werden dann wie folgt durchgeführt:

- a) Erzeuge für jede Eingangsgrösse  $X_i$  einen Wert  $x_i$  gemäss ihrer Verteilung  $g_i(x_i)$ . Dieses Verfahren ist für rechteckverteilte und normalverteilte Grössen explizit im Kapitel 3 angegeben. Man erhält also die Werte  $x_1, \dots, x_N$ .
- b) Setze die erhaltenen Werte  $x_1, \dots, x_N$  in der Funktion  $f$  ein, um einen Wert  $y$  für die Ausgangsgrösse  $Y$  zu bekommen.
- c) Wiederhole Punkte a) und b) um eine grössere Anzahl  $y$ -Werte zu erhalten. Die nötige Anzahl Wiederholungen hängt von der gewünschten Genauigkeit ab<sup>6</sup>. Am Ende hat man also eine Liste von  $M$   $y$ -Werten  $\{y_1, \dots, y_M\}$ .
- d) Schätze die Ausgangsgrösse  $Y$  durch Mittelwertbildung:

$$\bar{y} = \frac{1}{M} \sum_{r=1}^M y_r$$

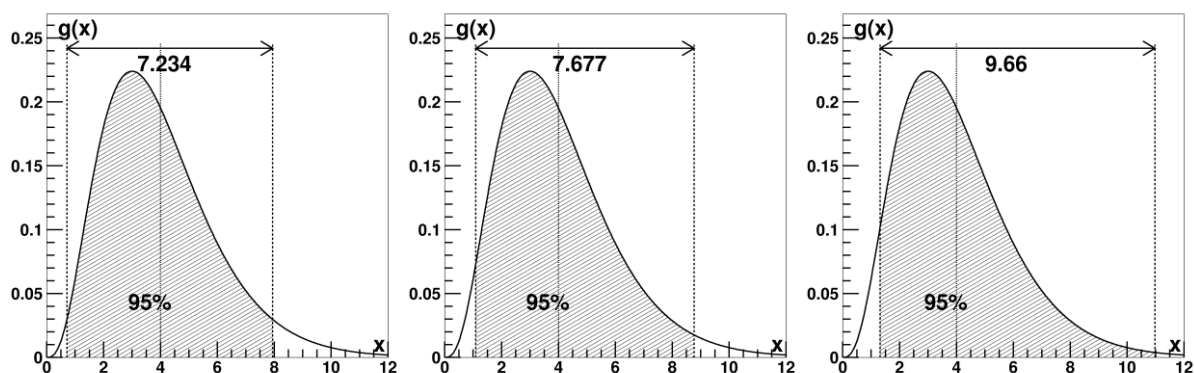
- e) Schätze die Standardunsicherheit  $u_c(y)$ :

$$u_c^2(y) = \frac{1}{M-1} \sum_{r=1}^M (y_r - \bar{y})^2$$

---

<sup>6</sup> Um die Breite eines Intervalls für eine Erweiterte Unsicherheit mit 95% Überdeckungswahrscheinlichkeit mit einer Genauigkeit von 1-2 signifikante Stellen zu erhalten werden Grössenordnungsmässig  $M = 10^6$   $y$ -Werte benötigt. Ein Verfahren, um die Genauigkeit während der Berechnung abzuschätzen wird in [1] präsentiert, sodass die Rechnungen abgebrochen werden können nachdem die gewünschte Genauigkeit erreicht ist.

- f) Ordne die  $M$   $y$ -Werte in aufsteigender Reihenfolge<sup>7</sup>. Man erhält dann eine geordnete Liste von  $y$ -Werten  $\{y'_1, \dots, y'_M\}$ <sup>8, 9</sup>.
- g) Bestimme die erweiterte Unsicherheit. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, ein Intervall, das einen Anteil  $p$  der  $y$ -Werte enthält, festzulegen: es müssen  $p \cdot M$  der  $M$   $y$ -Werte innerhalb dieses Intervalls liegen, die übrigen  $(1-p) \cdot M$  Werte ausserhalb. Nachfolgend sind zwei herkömmliche Möglichkeiten gegeben:
1. Für eine symmetrische Verteilung  $g(y)$  gibt es eine natürliche Wahl für dieses Intervall: es sollte um den Mittelwert  $\bar{y}$  symmetrisch sein. Dazu nimmt man den  $y$ -Wert  $y'_{q_1}$  der den Rang  $q_1 = M \cdot (1-p)/2$  in der geordneten Liste  $\{y'_1, \dots, y'_M\}$  hat, als untere Grenze des erweiterten Unsicherheitsintervalls, und  $y'_{q_2}$  mit  $q_2 = M \cdot p + q_1$  als obere Grenze (falls  $q_1$  und  $q_2$  keine ganzen Zahlen sind, werden sie aufgerundet).
  2. Falls die Verteilung  $g(y)$  nicht symmetrisch ist (was in der Regel der Fall ist, wenn die Funktion  $f$  nichtlinear ist), dann gibt es keine "natürliche" Wahl für das Vertrauensintervall. In [1] wird empfohlen, das kürzeste Intervall mit Überdeckungswahrscheinlichkeit  $p$  zu benutzen. Um es zu bestimmen, berechnet man die Breite  $\Delta y = (y'_{q_2} - y'_{q_1})$  aller möglichen Intervalle  $[y'_{q_1}, y'_{q_2}]$  mit  $q_1 = 1, \dots, M \cdot (1-p)$  und  $q_2 = M \cdot p + q_1$  und nimmt dasjenige mit dem kleinsten  $\Delta y$ .



**Figur 8:** Drei mögliche 95%-Vertrauensintervalle für eine so genannte „Gamma-Verteilung“. Links ist das kürzeste Intervall gezeigt (Breite 7.234), in der Mitte ist es das symmetrische Intervall (Breite 7.677), und rechts noch eine dritte mögliche Wahl (Breite 9.660). Die Vertikale Linie bei  $x = 4$  ist der Mittelwert der Verteilung. Offenbar steht sie nicht in der Mitte des symmetrischen Intervalls (Bild in der Mitte), da die Verteilung nicht symmetrisch ist. Die Wahl des kürzesten Intervalls garantiert, dass das Maximum der Verteilung immer inbegriffen ist.

<sup>7</sup> Diese Sortierung soll unbedingt mit einem effizienten Algorithmus durchgeführt werden, der eine Zeit proportional zu  $M \cdot \log(M)$  und nicht zu  $M^2$  benötigt.

<sup>8</sup> Ausgehend von dieser geordneten Liste von  $y$ -Werten  $\{y'_1, \dots, y'_M\}$  kann man direkt die Verteilungsfunktion  $G(y)$  konstruieren. Um das zu veranschaulichen, braucht man nur die Elemente dieser Liste auf ein Diagramm einzutragen: auf der horizontalen Achse werden die  $y'_r$ -Werte eingetragen, und der Rang  $r$  der Elemente in der Liste wird auf der vertikalen Achse eingetragen. Offenbar sind die Werte auf der vertikalen Achse gleichverteilt (sie sind die ganzen Zahlen zwischen 1 und  $M$ ), und wenn man zusätzlich die Werte auf dieser Achse durch  $M$  dividiert, dann erhält man eine Gleichverteilung auf dem Intervall  $[0,1]$ .

<sup>9</sup> Wenn man zwecks Veranschaulichung Histogramme von  $g(y)$  und  $G(y)$  aufzeichnen will, dann muss man nur die  $y$ -Werte in diskrete Klassen aufteilen und normalisieren (vgl. Abschnitt 3.1.1).

## 4.2 Beispiel: das Modell $Y = X^2$

Als einfaches Anwendungsbeispiel wird eine Messgrösse  $Y$ , die von einer einzigen Eingangsgrösse  $X$  abhängt, betrachtet. Diese zwei Grössen seien durch die Beziehung  $Y = f(X) = X^2$  verknüpft. Offenbar ist  $f$  eine nichtlineare Funktion. Die Grösse  $X$  habe einen Schätzwert  $x = 0.5$  und eine Standardunsicherheit  $u(x) = 0.2$ . Ziel ist die Bestimmung des Messresultats und einer erweiterten Unsicherheit mit 95% Vertrauensgrad.

Bemerkung: die Zwischenrechnungen werden absichtlich mit mehr signifikativen Stellen als üblich durchgeführt, um die Unterschiede zwischen dem Standard-GUM-Verfahren und der Monte Carlo Methode besser zu unterstreichen. Ausserdem wurde  $u(x)$  als gross angenommen, sodass die Nicht-Linearität von  $f$  sich besonders merkbar macht.

### Rechnung mit dem Standard-GUM-Verfahren

Die Ausgangsgrösse wird geschätzt durch

$$y = f(x) = f(0.5) = 0.5^2 = 0.2500$$

und

$$u_c(y) = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \cdot u^2(x)} = \sqrt{(2 \cdot 0.5)^2 \cdot 0.2^2} = 0.2000$$

wobei die Ableitung  $(\partial f / \partial x) = 2x$  eingesetzt wurde.

Unter Annahme einer Normalverteilung für  $Y$  ( $t$ -Verteilung mit  $\infty$ -vielen Freiheitsgraden) ist der Erweiterungsfaktor  $k_p = 1.96$  für  $p = 95\%$ . Die erweiterte Unsicherheit beträgt also

$$U_{95} = k_{95} \cdot u_c(y) = 1.96 \cdot 0.2000 = 0.3920$$

Das 95% Vertrauensintervall ist dann  $[y - U_{95}, y + U_{95}] = [-0.1420, 0.6420]$ . Man sieht, dass dieses Intervall problematisch ist: Negative Werte werden berücksichtigt, obwohl die Funktion  $f(X) = X^2$  keine negativen Werte annehmen kann.

### Standard-GUM-Verfahren unter Berücksichtigung der Terme 2. Ordnung

Da die Funktion  $f$  nichtlinear ist, ist es sinnvoll, die Terme 2. Ordnung für die Berechnung von  $y$  und  $u_c(y)$  zu berücksichtigen. Aus Modul MU-04 kann man entnehmen, dass

$$\begin{aligned} y &= f(x) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} u^2(x) = 0.5^2 + \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot 0.2^2 = 0.25 + 0.04 = 0.2900 \\ u_c(y) &= \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \cdot u^2(x) + \left[ \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right] \cdot u^4(x)} \\ &= \sqrt{(2 \cdot 0.5)^2 \cdot 0.2^2 + \left[ \frac{1}{2} \cdot 2^2 + (2 \cdot 0.5) \cdot 0 \right] \cdot (0.2)^4} = \sqrt{0.0400 + 0.0032} \\ &= 0.2078 \end{aligned}$$

wobei die Ableitungen  $(\partial f / \partial x) = 2x$ ,  $(\partial^2 f / \partial x^2) = 2$  und  $(\partial^3 f / \partial x^3) = 0$  eingesetzt wurden.

Bemerkung: Diese Korrektur 2. Ordnung für  $y$  ist für eine beliebige Verteilung der  $x$ -Werte gültig, aber die Korrektur für  $u_c(y)$  ist nur für normalverteilte  $x$ -Werte anwendbar. Wenn  $X$  nicht normalverteilt ist, dann gibt es noch weitere Terme 2. Ordnung für  $u_c(y)$ , die hier nicht inbegriffen sind.

Unter Annahme einer Normalverteilung für  $Y$  kann man wie oben eine erweiterte Unsicherheit als

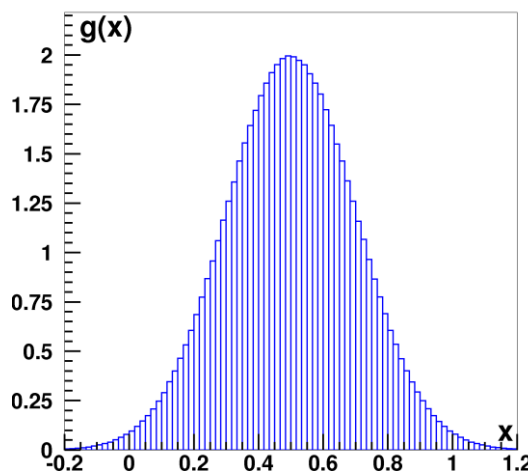
$$U_{95} = k_{95} \cdot u_c(y) = 1.96 \cdot 0.2078 = 0.4073$$

berechnen. Das 95% Vertrauensintervall ist also  $[y - U_{95}, y + U_{95}] = [-0.1173, 0.6973]$ . Das Vertrauensintervall enthält jedoch nach wie vor negative Werte.

### Monte Carlo Rechnung mit normalverteilten $X$

Um dieses Resultat mit der Monte Carlo Methode zu berechnen, muss man jetzt zusätzlich die Verteilung der Eingangsgrösse  $X$  kennen. In dieser Rechnung werden wir eine Normalverteilung annehmen, mit Mittelwert  $\mu = 0.5$  und Standardabweichung  $\sigma = 0.2$ .

Diese Rechnungen wurden mit einem Programm in der C-Programmiersprache durchgeführt, in dem  $M = 10^7$  gleichverteilte Zufallszahlen mit dem erweiterten Wichmann-Hill Generator berechnet wurden, und dann in normalverteilte Zahlen unter Verwendung der Box-Müller Transformation (siehe Abschnitt 3.3.4) umgerechnet wurden. Zehn Millionen Zufallszahlen sind ausreichend, um die Resultate mit einer Genauigkeit von 2 signifikativen Stellen zu erhalten.



**Figur 9:** Histogramm der Normalverteilung der Eingangsgrösse  $X$

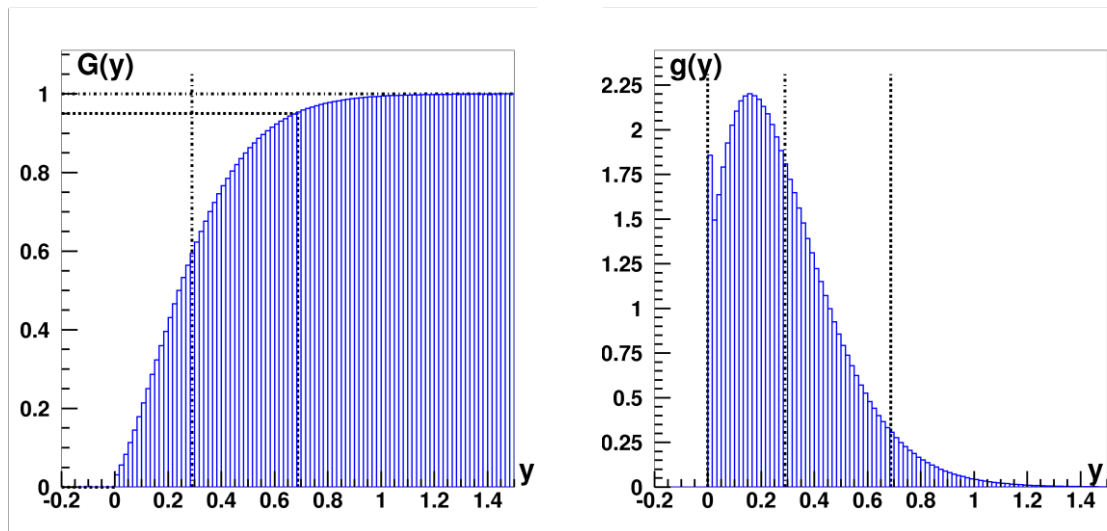
Unter Anwendung des obigen Verfahrens kann man die gesuchten Grössen aus der resultierenden geordneten Werteliste  $\{y_1, \dots, y_M\}$  bestimmen:

$$\bar{y} = \frac{1}{M} \sum_{r=1}^M y_r = 0.2900$$

$$u_c(y) = \sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{r=1}^M (y_r - \bar{y})^2} = 0.2078$$

95% Vertrauensintervall mit der kleinsten Breite:  $[0.0000, 0.6870]$





**Figur 10:** Histogramm der Verteilung der Ausgangsgrösse  $Y = X^2$ . Links ist die Verteilungsfunktion  $G(y)$  gezeigt, und rechts die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte  $g(y)$ . Die 3 vertikalen Linien (rechts) bezeichnen den Mittelwert der Verteilung (Strich-Punkt Linie bei  $y = 0.29$ ) und die Grenzen des 95% Vertrauensintervalls mit der kleinsten Breite. Dieselben Linien sind auch links gezeichnet.

#### Diskussion:

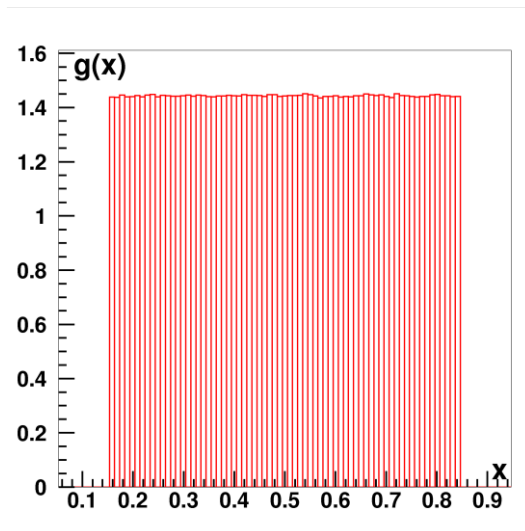
- Der Mittelwert  $y = 0.2900$  ist in perfekter Übereinstimmung mit dem Standard-GUM-Resultat, wenn Terme 2. Ordnung berücksichtigt werden. Der Grund dafür ist, dass alle Ableitungen dritter und höherer Ordnungen der Funktion  $f(X) = X^2$  Null sind, sodass die Korrektur 2. Ordnung das exakte Resultat liefert. Dies wäre z.B. für  $f(X) = X^3$  nicht der Fall. Das Standard-GUM-Verfahren ohne Berücksichtigung der Terme 2. Ordnung liefert den falschen Mittelwert.
- Die Standardunsicherheit  $u_c(y) = 0.2078$  stimmt aus demselben Grund mit dem Standard-GUM-Resultat unter Berücksichtigung der Terme 2. Ordnung überein.
- Das 95% Vertrauensintervall enthält hier nur positive Werte, was für eine positiv-definite Funktion  $f(X) = X^2$  sinnvoll ist. Das Monte Carlo Verfahren liefert das kürzeste 95% Vertrauensintervall als  $[0.0000, 0.6870]$ . Da die Verteilung der  $y$ -Werte nicht symmetrisch ist, ist es nicht sinnvoll, ein symmetrisches Intervall anzugeben<sup>10</sup>.

#### Monte Carlo Rechnung mit rechteckverteilten $X$

Oben wurde angenommen, dass die Eingangsgrösse  $X$  normalverteilt sei. Nachfolgend werden unter der Annahme rechteckverteilter  $x$ -Werte die gleichen Rechnungen wiederholt. Die Verteilung von  $x$  hat wiederum den Mittelwert  $\mu = 0.5$  und die Standardabweichung  $\sigma = 0.2$ , d.h. eine totale Breite  $2\sigma\sqrt{3} = 2 \cdot 0.2 \cdot 1.732 = 0.6928$ .

Die Rechnungen wurden völlig analog zu den obigen durchgeführt, unter direkter Verwendung der gleichverteilten Zufallszahlen aus dem erweiterten Wichmann-Hill Generator.

<sup>10</sup> Aus der Monte Carlo Rechnung kann auch ein symmetrisches Intervall berechnet werden:  $[0.0125, 0.7954]$ . Es ist das Intervall, für das 2.5% der  $y$ -Werte links und 2.5% der  $y$ -Werte rechts ausserhalb des Intervalls liegen, aber der Mittelwert  $y = 0.2900$  liegt nicht in der Mitte.



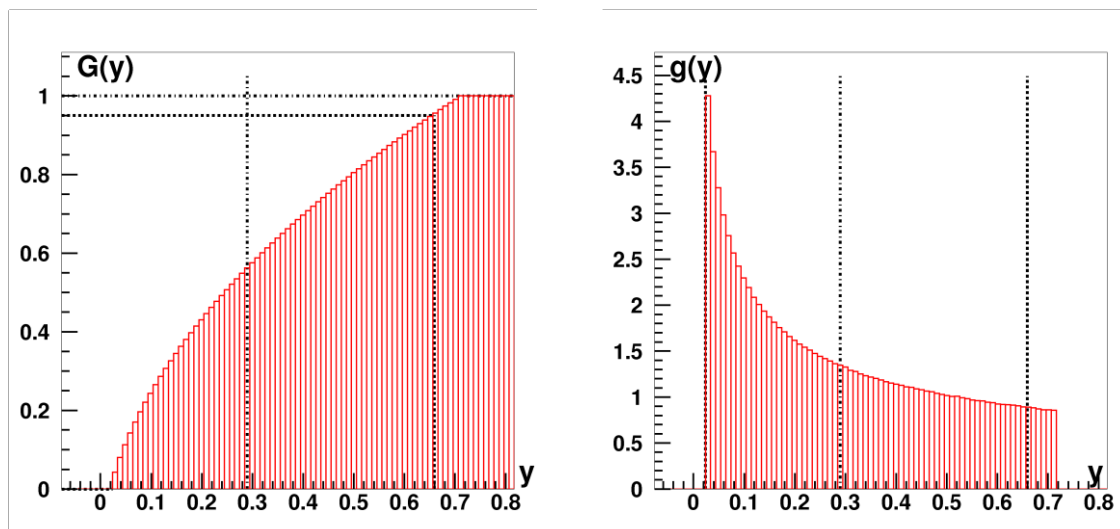
**Figur 11:** Histogramm der Rechteckverteilung der Eingangsgröße  $X$

Resultate:

$$\bar{y} = \frac{1}{M} \sum_{r=1}^M y_r = 0.2900$$

$$u_c(y) = \sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{r=1}^M (y_r - \bar{y})^2} = 0.2032$$

95% Vertrauensintervall mit der kleinsten Breite: [0.0236 , 0.6589]



**Figur 12:** Histogramm der Verteilung der Ausgangsgröße  $Y = X^2$ . Links ist die Verteilungsfunktion  $G(y)$  gezeigt, und rechts die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte  $g(y)$ . Die 3 Linien bezeichnen den Mittelwert der Verteilung (Punkt-Strich Linie bei  $y = 0.29$ ) und die Grenzen des 95% Vertrauensintervalls mit der kleinsten Breite.

#### Diskussion:

- Der Mittelwert  $y = 0.2900$  ist hier auch in perfekter Übereinstimmung mit dem Standard-GUM-Resultat, wenn Terme 2. Ordnung berücksichtigt werden.
- Die Standardunsicherheit  $u_c(y) = 0.2032$  stimmt mit dem 2. Ordnung Standard-GUM-Resultat nicht überein. Der Grund wurde oben erwähnt: die Korrekturen 2. Ordnung des Standard-GUM-Verfahrens sind nur für normalverteilte  $X$  gültig, was hier nicht der Fall ist. Diese Standardunsicherheit ist auch anders als diejenige, die für normalverteilte  $X$  mit der Monte Carlo Methode erhalten wurde. Dieses Resultat zeigt dass es relevant sein kann, die genauen Verteilungen der Eingangsgrößen zu berücksichtigen.
- Das 95% Vertrauensintervall ist hier anders als für normalverteilte  $X$ . Da die Rechteckverteilung Werte grösser Null nur auf einem endlichen Intervall annimmt ist das Vertrauensintervall auch schmaler: seine Breite ist hier 0.6353 statt 0.6870 für normalverteilte  $X$ .

## 5. Schlussbemerkungen

Sowohl das Standard-GUM-Verfahren als auch die Monte Carlo Simulation sind Näherungsmethoden zur Messunsicherheitsabschätzung. Das Standard-GUM-Verfahren ist in wenigen aber wichtigen Situationen exakt, hingegen ist die Monte-Carlo-Methode nie exakt. Letztere ist aber in einem breiteren Spektrum von Problemen anwendbar. Da die Resultate der Monte Carlo Simulation durch Mittelwertbildung aus einer grösseren Anzahl Modellwerte  $y_i = f(x_{1i}, \dots, x_{Ni})$ ,  $i = 1, \dots, M$ , berechnet werden, kann man erwarten, dass die Resultate proportional zu  $1/\sqrt{M}$  gegen die richtige Erwartungswert  $E(Y)$  und Varianz  $V(Y)$  gehen. Einige Bedingungen müssen für die Funktion  $f$  und die Verteilung  $g(Y)$  erfüllt sein, damit die Monte Carlo Methode anwendbar ist ( $f$  muss stetig sein,  $g(Y)$  darf nur ein einziges Maximum aufweisen, usw.), aber in der Praxis ist dies fast immer der Fall (siehe [1] für eine detaillierte Diskussion).

Beim Monte-Carlo-Verfahren werden die Empfindlichkeitskoeffizienten, die in der Unsicherheitsfortpflanzungsformel vorkommen, nicht mehr benötigt. Die effektive Anzahl der Freiheitsgrade für die Ausgangsgrösse  $Y$  ist ebenso irrelevant.

Die Monte Carlo Methode kann Situationen behandeln, bei denen die Verteilungen der Eingangsgrößen  $g_i(X_i)$  nicht symmetrisch sind, bei denen die Modellfunktion  $f$  nicht-linear ist, und bei denen die Eingangsgrößen  $X_i$  korreliert sind. Hinweise zur Erzeugung korrelierter Verteilungen finden sich in [1]. Die Monte Carlo Methode kann Probleme behandeln, bei denen alle diese Schwierigkeiten gleichzeitig auftreten.

Der GUM-Zusatz [1] empfiehlt, Monte Carlo Simulation zur Validierung von Resultaten anzuwenden in Fällen, wo die Gültigkeit des Standard-GUM-Verfahrens unsicher ist.

## Literaturverzeichnis

- [1] Joint Committee for Guides in Metrology, *Evaluation of measurement data — Supplement 1 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement" — Propagation of distributions using a Monte Carlo method*, JCGM 101:2008, First edition 2008 (verfügbar über die Suchfunktion auf <http://www.bipm.org>)
- [2] Joint Committee for Guides in Metrology, *Evaluation of measurement data — Supplement 2 to the "Guide to the expression of uncertainty in measurement" — Extension to any number of output quantities*, JCGM 102:2011, October 2011 (verfügbar über die Suchfunktion auf <http://www.bipm.org>)
- [3] D. E. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Vol. 2: Seminumerical Algorithms, 2nd Edition, Addison-Wesley, Reading Mass., 1981
- [4] S. K. Park and K. W. Miller, *Random Number Generators: Good Ones are Hard to Find*, Comm. of the ACM, **31** (10), 1192-1201, 1988