

2º Encontro Nacional
da Sociedade Portuguesa de Metrologia
Lisboa, 17 de Novembro de 2006

MÉTODO DE MONTE CARLO: ABORDAGEM ALTERNATIVA AO GUM?

Álvaro Silva Ribeiro

Laboratório Nacional de Engenharia Civil, Lisboa, Portugal, asribeiro@lnec.pt

1. INTRODUÇÃO

O GUM (*Guide for the Expression of Uncertainty in Measurement*) [1] foi publicado pela ISO em 1993 (re-editado em 1995) e, desde então, constitui o documento de referência para a avaliação de incertezas de medição.

No período subsequente e até à actualidade, o GUM tem sido aplicado com sucesso a muitos problemas de natureza metrológica. Contudo, em consequência de factores associados à sua rápida disseminação e ao desenvolvimento da Metrologia, têm sido reveladas fragilidades significativas. É devido a estas que tem sido suscitada a necessidade de se encontrarem outras vias que permitam concretizar a avaliação das incertezas de medição, nomeadamente, em circunstâncias onde o GUM não corresponde às expectativas.

No início desta década surgiram os primeiros estudos visando a aplicação de novas metodologias para a avaliação de incertezas de medição, designadamente, suportadas na simulação e análise numérica. O método apontado, para este efeito, foi o método de Monte Carlo (MCM).

O surgimento desta nova abordagem conduziu a que as organizações internacionais que publicaram o GUM, entendendo a importância desta matéria, dinamizassem o Grupo de Trabalho 1 (WG1), no seio da Comissão (JCGM – Joint Committee for Guides in Metrology) no sentido de estudar e promover a revisão do GUM e desenvolver documentos suplementares relacionados com a avaliação de incertezas de medição.

O reconhecimento formal das fragilidades do GUM e da necessidade de recurso a outras abordagens traduz-se na elaboração, por este grupo de trabalho, de 3 suplementos a juntar ao GUM, actualmente, em fase final de discussão para publicação:

- Supplement 1 to the “*Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*” – Propagation of distributions using a Monte Carlo method;
- Supplement 2 to the “*Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*” – Models with any number of output quantities;
- Supplement 3 to the “*Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*” – Modelling.

Esta evolução parcelar de uma das vertentes da Metrologia mostra que esta é, ainda, um ramo da ciência que se encontra longe da pretendida estabilidade, possuindo um elevado potencial de progressão.

2. REQUISITOS, PRESSUPOSTOS E FRAGILIDADES DO GUM

A metodologia proposta no GUM tem como suporte o desenvolvimento em série de Taylor de 1ª ordem (admitindo a utilização das componentes de ordem superior com um correspondente acréscimo de cálculo), o que determina um conjunto de restrições ao tipo de modelos matemáticos a que se aplica.

A estrutura inerente ao processo de avaliação de incertezas requer, na sua fase de formulação, que se conheça um conjunto de informação essencial, associada às grandezas de entrada do modelo matemático: as suas funções distribuição de probabilidade (FDP); os parâmetros dessas FDP; e a forma de obtenção dessa informação (no GUM, essa forma implica a diferenciação em componentes do tipo A ou do tipo B consoante resultem, respectivamente, da adopção de uma via frequentista ou bayesiana).

Na fase subsequente à de formulação, designada por fase de cálculo, encontram-se restrições inerentes à natureza da metodologia utilizada, as quais, nem sempre são devidamente aplicadas e validadas.

Estas restrições traduzem-se em requisitos para a aplicação do GUM apresentando-se, em seguida, uma síntese daqueles que são considerados mais importantes:

- modelos matemáticos lineares ou cuja não-linearidade seja pouco acentuada;
- modelos matemáticos diferenciáveis em todo o domínio de interesse;
- modelos com relações explícitas;
- conhecimento dos graus de liberdade de todas as contribuições para a avaliação de incerteza (quer sejam provenientes de análises do tipo A ou do tipo B).

Por outro lado, o GUM incorpora pressupostos, alguns dos quais são assumidos explicitamente na descrição do mesmo:

- grandezas de entrada dos modelos possuem FDPs simétricas e centradas em zero;
- acesso às contribuições devido à correlação entre grandezas de entrada;
- admissão da FDP normal associada à grandeza de saída.

Da aplicação inapropriada do GUM a modelos ou sistemas que não cumprem os requisitos e os pressupostos apontados, resultam as suas principais fragilidades, cujo reflexo é a incorrecção associada à expressão do resultado de medição.

Numa perspectiva global, uma fragilidade que deve ser apontada resulta da forma como se estabelece a abordagem suportada no GUM. Com efeito, esta metodologia recorre às FDP associadas às grandezas de entrada utilizando apenas as suas variâncias enquanto que, no que se concerne à grandeza de saída, fornece apenas a variância e não a FDP, o que, como se verá adiante, pode ser uma forte limitação do conteúdo informativo associado ao resultado da medição e representa um aspecto fundamental na diferenciação face ao método de Monte Carlo.

Este enquadramento fornece um conjunto de argumentos que justificam a procura de outras soluções para a diversidade de problemas metrológicos cuja solução não se encontra na aplicação do GUM.

3. APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO À MEDIÇÃO DE GRANDEZAS

O método de Monte Carlo, é um método de simulação e análise numérica cuja origem remonta aos anos 50, tendo sido aplicado com sucesso a diferentes áreas do conhecimento científico.

Esta sua “antiguidade” traduz-se, no que se refere à sua utilização em Metrologia, num benefício, uma vez que o conhecimento acumulado noutros domínios permite dispor de diversificadas soluções para os requisitos da sua implementação, devidamente testadas e validadas, garantindo *a priori* um considerável nível de segurança e de qualidade.

Na sua essência, esta metodologia visa efectuar a simulação de fenómenos de natureza estocástica, requerendo a informação probabilística associada às grandezas de entrada de um modelo matemático, a expressão do próprio modelo e um conjunto de algoritmos que constituem o seu procedimento característico, com vista a obter a informação relevante acerca das grandezas de saída desse modelo.

A compreensão da aplicação do MCM à análise da medição parte da descrição do problema numa perspectiva probabilística como a que se apresenta na Fig. seguinte.

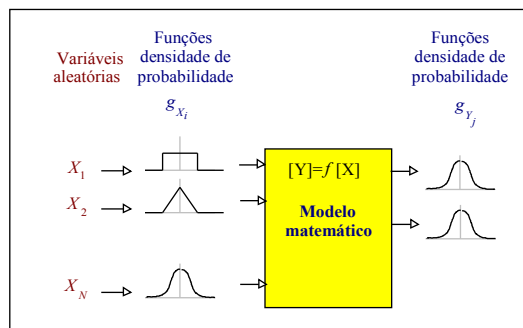


Figura 1: Esquema de conversão da informação de entrada em informação de saída usando um modelo matemático para representação da medição

Nesta, o problema da medição equaciona-se como a convolução de FDPs [2] associadas às grandezas de entrada (X_i) que, combinadas de acordo com um modelo matemático, originam as FDPs das grandezas de saída (Y_j).

O processo de simulação envolve cinco etapas fundamentais:

- a geração de sequências de números pseudo-aleatórios (com FDP uniforme);

- a conversão das sequências geradas noutras com FDP de acordo com as especificidades de cada uma das grandezas de entrada;
- a combinação das sequências de acordo com o modelo matemático, originando as sequências associadas às grandezas de saída;
- a ordenação das sequências de saída;
- a obtenção dos percentis e a execução de testes de exactidão.

Cada uma destas etapas envolve preocupações específicas, uma vez que a sua concretização com ferramentas aplicadas de forma indevida constitui um factor de insucesso da simulação.

Assim, para concretizar a primeira etapa, é necessário dispor de um gerador de números pseudo-aleatórios (GNPA) devidamente testado e validado (por exemplo, os geradores baseados nos algoritmos congruenciais de L'Ecuyer [3] ou de Hill e Wichmann [4]).

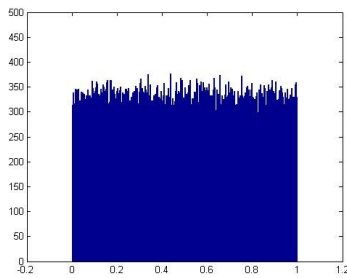


Figura 2: FDP uniforme (100 000 números), gerada pelo gerador de Hill e Wichmann

A segunda etapa requer o conhecimento de metodologias que permitam efectuar a conversão de sequências de números com FDP uniforme em outras FDP de interesse. A conversão de FDPs uniformes em grande parte das outras FDP utilizadas (uniforme, triangular, de configuração U) resulta da aplicação do método de transformação inversa [5,6]. A obtenção de sequências com FDP normal, por sua vez, é obtida usando o algoritmo de Box-Muller [6]. Dois exemplos de FDPs obtidas usando estes dois métodos encontram-se nas Figuras 3 e 4.

A terceira etapa requer que o suporte de programação utilizado para combinar as sequências numéricas de acordo com o modelo matemático seja suficientemente robusto para minimizar os riscos associados aos limites inerentes à utilização de processos de cálculo de natureza computacional.

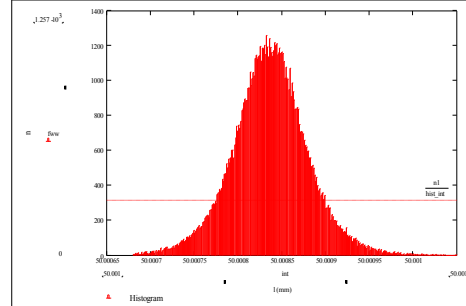


Figura 3: FDP normal (100 000 números), produzida usando o algoritmo de Box-Muller

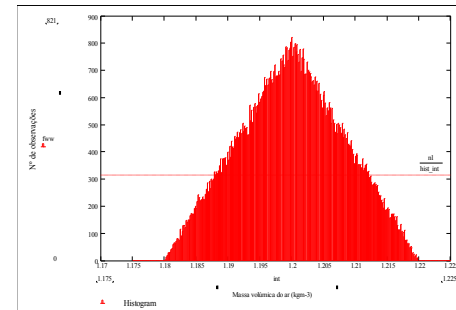


Figura 4: FDP triangular (100 000 números), produzida usando o método de transformação inversa

A quarta etapa envolve a ordenação das sequências existindo, para o efeito, diversos algoritmos conhecidos. Esta etapa, porém, requer a utilização de ferramentas optimizadas de modo a minimizar a ocupação de tempo de computação. Uma das vias testadas com sucesso resulta da utilização da rotina de ordenação “QuickSort” optimizada [7].

Finalmente, a quinta etapa envolve a obtenção dos percentis que definem os intervalos de confiança pretendidos, tarefa facilitada com a ordenação prévia da(s) sequência(s) de saída, e os intervalos de confiança associados a cada um desses percentis (estimadores da exactidão da simulação). Estes últimos são obtidos recorrendo a técnicas estatísticas como a que é descrita por Cox [6]. De acordo com esta técnica, para o percentil de ordem (Np), o intervalo de confiança (95%) respectivo é dado por:

$$Np \pm 2\sqrt{Np(1-p)} \quad (1)$$

Como se referiu, a importância desta informação decorre do facto dela ser indicativa do grau de exactidão da simulação e, como tal, comparável com o grau de exactidão requerido, *ab initio*, pelo problema metrológico. Essa análise comparativa permite validar os resultados obtidos ou, em alternativa, impor o aumento da dimensão das sequências numéricas de modo a se atingir esse grau de exactidão.

Actualmente, encontra-se uma diversidade de *software* comercial que implementa algumas destas funções. Contudo, deve-se fazer notar que, frequentemente, estas não se encontram devidamente documentadas e/ou validadas.

No que concerne à representação do resultado da medição, este é um aspecto que distingue o MCM do GUM. Com efeito, o GUM recomenda a utilização de uma expressão que resulta de se considerar que esse resultado dispõe da simetria inerente à adopção da distribuição normal como FDP de saída:

$$\bar{y} \pm U_{95}(y) \quad (2)$$

onde \bar{y} representa a estimativa da mensuranda (neste caso, a média) e $U_{95}(y)$ representa a semi-amplitude do intervalo de incerteza (com um nível de confiança de 95%).

A expressão do resultado da medição usando o MCM, por não admitir *a priori* uma configuração para a FDP, exprime-se em termos genéricos na forma seguinte:

$$\hat{y}; [y_{\alpha/2}; y_{1-\alpha/2}] \quad (3)$$

Onde \hat{y} é o estimador da mensuranda (não necessariamente a média), e o intervalo de incerteza é indicado por: $[y_{\alpha/2}; y_{1-\alpha/2}]$, cujos termos expostos representam os percentis respectivos e $(1-\alpha)$ o nível de confiança que se pretende atingir.

4. POTENCIAL DO MCM

A ilustração do potencial do MCM revela-se de forma eficaz através da apresentação de alguns estudos que evidenciam a capacidade deste método para aceder à informação completa relativa ao resultado da medição e as vantagens daí decorrentes. Neste sentido, são apresentados três estudos envolvendo: um modelo multivariável; e dois modelos não-lineares cuja distribuição de probabilidade de saída não corresponde ao padrão expectável do GUM.

4.1 Modelo matemático multivariável

Os modelos matemáticos multivariáveis constituem uma categoria de problemas metrológicos de avaliação de incertezas onde algumas restrições impostas pelo GUM são inultrapassáveis, podendo recorrer-se ao MCM como abordagem apropriada para aceder à pretendida solução.

Um caso prático de aplicação destes modelos consiste na transformação de coordenadas cartesianas

em coordenadas esféricas, fazendo uso de um conjunto de relações que incorporam funções trigonométricas. Este tipo de problemas tem uma aplicação vasta em Metrologia, nomeadamente, na medição de grandezas dimensionais e geométricas utilizando máquinas de medição 3D e padrões, como se observa na fig. seguinte.

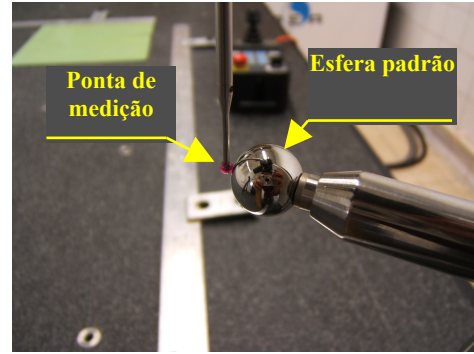


Figura 5: Medição de grandezas dimensionais e geométricas no LNEC

As relações estabelecidas entre os dois sistemas de coordenadas têm as seguintes expressões:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (4)$$

$$\varphi = \arctg\left(\frac{y}{x}\right) \quad (5)$$

$$\theta = \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right) \quad (6)$$

Em relação às grandezas de entrada (x, y, z) , considera-se que as suas variabilidades encontram-se associadas a FDPs de configuração normal de acordo com as seguintes parametrizações: $X \rightarrow N(10;1)$, $Y \rightarrow N(5;0,5)$ e $Z \rightarrow N(20;2)$, sendo a unidade associada aos parâmetros apresentados o cm.

A aplicação do MCM tem como suporte numérico a realização de três sequências de 100 000 simulações cada (uma para cada grandeza de entrada), as quais, são aplicadas nas expressões do modelo matemático (4 a 6), de que resulta a obtenção das FDPs das grandezas de saída (r, φ, θ) . As configurações respectivas são expostas nas figuras 6 a 8 e os seus intervalos de incerteza descritos na tabela 1.

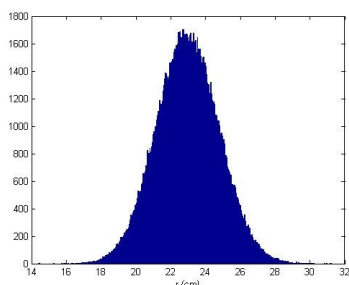


Figura 6: FDP de saída associada à grandeza raio

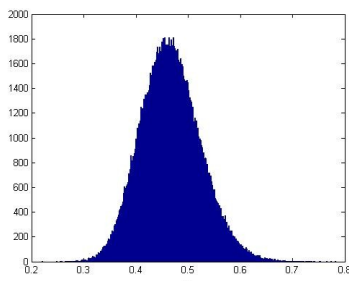


Figura 7: FDP de saída associada ao ângulo ϕ

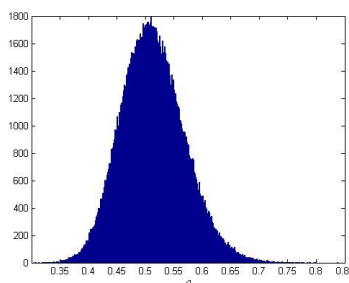


Figura 8: FDP de saída associada ao ângulo θ

Tabela 1: Resultados da aplicação do MCM ao modelo matemático multivariável

| Grandeza: r | Valor |
|--|-----------------------|
| Média | 22,96 cm |
| Intervalo de incerteza expandida (95%) | [19,48 ; 26,51] cm |
| Exactidão dos percentis (da incerteza) | 0,04 cm |
| Grandeza: ϕ | Valor |
| Média | 0,466 ° |
| Intervalo de incerteza expandida (95%) | [0,361 ° ; 0,586 °] |
| Exactidão dos percentis (da incerteza) | 0,0017 ° |
| Grandeza: θ | Valor |
| Média | 0,513 ° |
| Intervalo de incerteza expandida (95%) | [0,411 ° ; 0,630 °] |
| Exactidão dos percentis (da incerteza) | 0,0017 ° |

4.2 Modelo matemático tipo $y=e^{-x}$

O estudo apresentado a seguir refere-se a modelos matemáticos não-lineares cujas expressões envolvem o cálculo de valores exponenciais. Encontram-se aplicações deste tipo em diferentes domínios, nomeadamente, na medicina onde se utilizam substâncias radioactivas em técnicas terapêuticas e se controlam variáveis como a dosagem e o tempo de exposição.

Neste contexto particular, a relação estabelecida entre a dose aplicada e a duração de tempo traduz-se na *Lei de Decaimento radioactivo* [8] cuja expressão é a seguinte:

$$N = N_0 \cdot e^{-\lambda \cdot t} = N_0 \cdot e^{-(0,693t)/t_{1/2}} \quad (7)$$

onde N_0 representa o número de átomos radioactivos presentes no instante $t=0$, N o número de átomos radioactivos presentes no instante t , λ é a constante de decaimento ou constante de desintegração e $t_{1/2}$ o período de tempo necessário para que uma dada quantidade de um radionuclídeo decaia para metade do seu valor inicial.

A ilustração da forma como o MCM permite aceder à informação relevante neste tipo de medição resulta de se admitir, por exemplo, que a variável X possui uma estimativa de 10 unidades e uma incerteza de medição padrão de ± 1 unidade. Admite-se que a FDP da grandeza de entrada é uniforme, efectuando-se a geração de uma sequência de valores associada à grandeza X com 100 000 simulações e limites (10 ± 1) , e os valores dessa sequência são aplicados no modelo matemático $y=e^{-x}$, originando a FDP da grandeza de saída.

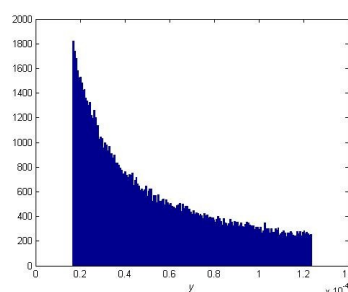


Figura 9: FDP associada à grandeza de saída (100 000 números) aplicando MCM e o modelo $y=e^{-x}$

O MCM fornece os parâmetros de interesse desta FDP, expostos na tabela que se segue.

Tabela 2: Resultados da aplicação do MCM ao modelo matemático $y=e^{-x}$

| Parâmetro | Valor |
|--|--|
| Média (M) | $5,334 \cdot 10^{-5}$ |
| $V_{\max} - M$ | $7,0074 \cdot 10^{-5}$ |
| $V_{\min} - M$ | $3,6632 \cdot 10^{-5}$ |
| Mediana | $4,5262 \cdot 10^{-5}$ |
| Intervalo de incerteza expandida (95%) | $[1,754 \cdot 10^{-5}; 1,174 \cdot 10^{-4}]$ |
| Exactidão dos percentis (da incerteza) | $7 \cdot 10^{-8}$; $4 \cdot 10^{-7}$ |

Estes resultados, obtidos usando o MCM e representados na Fig. 10, evidenciam aspectos como a localização descentrada das estimativas (média e mediana) e a assimetria do intervalo de incerteza expandida face a qualquer uma dessas estimativas. Este tipo de informação é inacessível quando se aplica o GUM na avaliação de incertezas de medição.

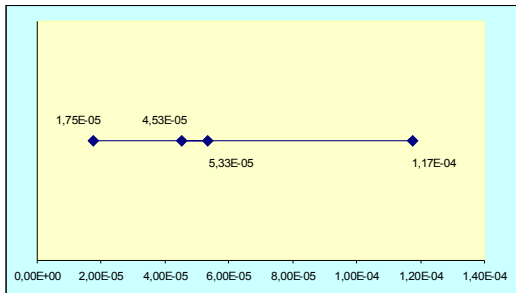


Figura 10: Representação da média, mediana, e limites do intervalo de incerteza expandida (95%)

4.3 Modelo matemático tipo $y=x^2$

O terceiro estudo envolve um modelo matemático onde é preponderante o efeito que as condições iniciais do problema determinam relativamente à configuração da FDP de saída, evidenciando a capacidade de percepção adquirida com a utilização do MCM face ao desconhecimento de informação relevante que a aplicação do GUM pode suscitar.

Este estudo tem como base um exemplo proposto por Cox [9], no qual se considera que a grandeza de entrada, X , possui uma FDP de configuração normal: $X \rightarrow N(1,2 ; 0,5)$,

A simulação MCM tem como suporte uma sequência numérica de 100 000 simulações com FDP normal, de acordo com os parâmetros apontados anteriormente. A aplicação do modelo matemático origina a FDP de saída conforme exposto na Fig. seguinte e os resultados que constam do tabela 3.

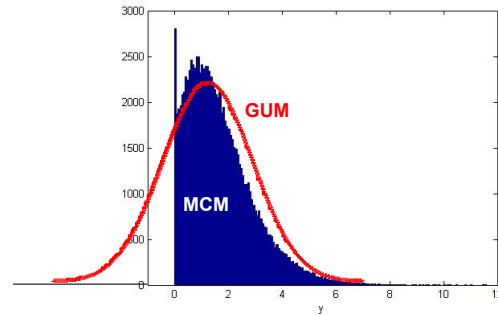


Figura 11: FDP associada à grandeza de saída, y , usando o GUM e o MCM

A adoção do GUM, neste caso, apontaria o valor médio de y para 1,44, obtido a partir do valor médio de $x = 1,2$. Verifica-se que esse valor é aproximado da estimativa da mediana obtida pelo MCM, sendo diferente da estimativa da média obtida pelo MCM (1,688).

Tabela 3: Resultados da aplicação do MCM ao modelo matemático $y=x^2$

| Parâmetro | Valor |
|--|---------------------------------------|
| Mediana | 1,439 |
| Média | 1,688 |
| Valor mínimo (x) | $8 \cdot 10^{-8} \approx 0$ |
| Valor máximo (x) | 11,592 |
| Intervalo de incerteza expandida (95%) | $[0,055 ; 4,749]$ |
| Exactidão dos percentis (da incerteza) | $7 \cdot 10^{-3}$; $7 \cdot 10^{-2}$ |

O conhecimento da configuração da FDP de saída revela-se, neste caso, fundamental, permitindo a obtenção dos parâmetros que são expostos na Fig. 12.

Nesta, alguns aspectos merecem destaque:

- a existência de dois máximos, um dos quais absoluto (que se encontra em 0) e um outro local (próximo de 0,8);
- a diferença observada entre o valor médio e a mediana;
- a assimetria do intervalo de incerteza expandida.

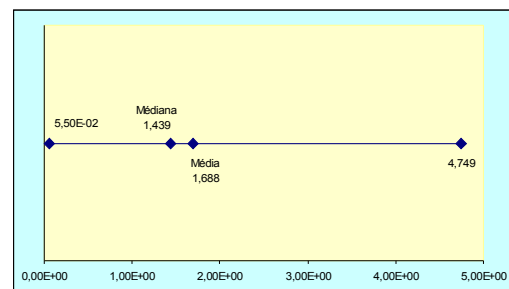


Figura 12: Representação da média, mediana, e limites do intervalo de incerteza expandida (95%) obtidos por MCM

5. CONCLUSÕES

Os estudos apresentados consolidam a ideia de que o MCM constitui uma metodologia com maior potencial de aplicação na avaliação de incertezas de medição do que o GUM, uma vez que pode ser aplicada em diversos contextos onde o GUM possui fortes constrangimentos e fragilidades, destacando-se aquelas em que:

- o modelo matemático é fortemente não linear;
- o modelo contém relações implícitas;
- o modelo não é diferenciável;
- as distribuições de probabilidade das grandezas de entrada e/ou de saída são assimétricas;
- o contexto da análise não se restringe à vizinhança do ponto de observação e se admite um comportamento não linear nessa vizinhança.

Neste sentido, o MCM não representa, simplesmente, uma abordagem alternativa ao GUM, mas uma abordagem de âmbito mais abrangente.

Quando se tratam problemas de natureza metrológica onde ambas as abordagens são aplicáveis, pode-se considerar que o MCM possui vantagens significativas por duas razões fundamentais:

- o facto do MCM não requerer o cumprimento de uma diversidade de pressupostos e requisitos inerentes ao GUM (simetria das FDP associadas às grandezas de entrada; diferenciabilidade do modelo matemático; conhecimento do número de graus de liberdade de cada componente de incerteza; adopção da FDP normal associada à grandeza de saída; entre outros);
- o facto do MCM permitir aceder a uma informação completa do resultado da mensuranda, fornecendo a sua estimativa, incerteza, e configuração da FDP, ao contrário do GUM, que fornece apenas os limites do intervalo de incerteza.

Estes aspectos citados permitem concluir que o MCM constitui uma metodologia de referência face ao GUM, possuindo um campo de aplicação e um acervo de informação consideravelmente superiores, extravasando de um papel meramente concorrencial.

Estas características do MCM, apoiadas nos factos da sua aplicação não requerer aproximações dos modelos matemáticos envolvidos e de convergir para a solução exacta permitem, também, ao MCM desempenhar a função de metodologia de referência na validação de resultados determinados pelo GUM, quando se admite a aplicação deste em contextos que incorporam aproximações no modelo matemático.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] GUM – *Guide for the Expression of Uncertainty in Measurement*. International Organization for Standardization. Genève, (Suíça). 1993, re-editado em 1995.
- [2] Dietrich, C.F. – *Uncertainty, Calibration and Probability*, 2nd Ed. Adam Hilger (Reino Unido). 1991.
- [3] L'Ecuyer, P. – Combined Multiple Recursive Random Number Generators. In *Oper. Res.* **44**, 5, 816-822. 1996.
- [4] Hill, I. and Wichmann, B. – An efficient and portable pseudo-random number generator, In *Applied Stat.* **31**, 188-190. 1982.
- [5] Rubinstein, R.Y. – *Simulation and the Monte Carlo Method*. John Wiley (E.U.A.). 1981.
- [6] Ribeiro, A.S. – *Avaliação de Incertezas de Medição em Sistemas Complexos Lineares e Não-Lineares*. Tese de Doutoramento em Física. Universidade de Lisboa (Portugal). 2006.
- [7] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. and Vetterling, W.T. – *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press (E.U.A.). 1986.
- [8] Krane, K.S. – *Introductory Nuclear Physics*, John Wiley & Sons (Singapore). 1988.
- [9] Cox, M. G, Dainton, M.P. and Harris, P. M. – *Software Support for Metrology Best Practice Guide No. 6: Uncertainty and Statistical Modelling*. Ed. Crown, National Physical Laboratory. Teddington (Reino Unido). 2001.