

몬테카를로 방법과 ISO-GUM 방법의 불확도 평가 결과 비교

하영철*† · 허재영* · 이승준* · 이강진*

* 한국가스공사 연구개발원

Comparison of ISO-GUM and Monte Carlo Method for Evaluation of Measurement Uncertainty

Young-Cheol Ha*† · Jae-Young Her*, Seung-Jun Lee* and Kang-Jin Lee*

* Gas Quality and Flow Measurement Lab, R&D Division, Korea Gas Corporation,

(Received February 19, 2014 ; Revised May 28, 2014 ; Accepted May 29, 2014)

Key Words: Monte-Carlo Method(몬테카를로 방법, MCM), Uncertainty(불확도), Calibration(교정), Propagation of Distribution(확률 분포 전파)

초록: 본 연구에서는 ISO GUM(불확도 표현 지침서)의 불확도 평가 방법을 보완하기 위해, 몬테카를로 방법(Monte Carlo Method, MCM)을 적용한 불확도 해석 프로그램을 개발하고, MCM과 GUM의 평가 결과를 비교하였다. 그 결과 다음과 같은 결과를 도출하였다. 첫째, 측정량의 확률 분포가 정규 분포가 아닌 때에도 MCM 방법은 정확한 포함 구간을 제공한다. 둘째, 정규 분포가 아닌 다른 분포들 몇몇 개가 합성되는 경우 그 확률 분포가 정규로 보이더라도 실제로는 정규가 아닌 경우가 있으며, 이의 판단은 합성 분산의 확률 분포로 할 수 있다. 셋째, 자유도가 낮은 A형 불확도가 불확도 평가에 포함된 경우 GUM은 포함 구간을 저평가하는 것을 알 수 있었고, 이러한 저평가 문제는 A형 표준 불확도에 t-분포의 표준 편차를 곱해주면 사라지는 것을 알 수 있었다. 이 경우 합성 분산의 유효 자유도는 확장 불확도 계산에 불필요하고, 신뢰의 수준 95 %의 포함 인자는 1.96이 적정한 것을 알 수 있었다.

Abstract: To supplement the ISO-GUM method for the evaluation of measurement uncertainty, a simulation program using the Monte Carlo method (MCM) was developed, and the MCM and GUM methods were compared. The results are as follows: (1) Even under a non-normal probability distribution of the measurand, MCM provides an accurate coverage interval; (2) Even if a probability distribution that emerged from combining a few non-normal distributions looks as normal, there are cases in which the actual distribution is not normal and the non-normality can be determined by the probability distribution of the combined variance; and (3) If type-A standard uncertainties are involved in the evaluation of measurement uncertainty, GUM generally offers an under-valued coverage interval. However, this problem can be solved by the Bayesian evaluation of type-A standard uncertainty. In this case, the effective degree of freedom for the combined variance is not required in the evaluation of expanded uncertainty, and the appropriate coverage factor for 95 % level of confidence was determined to be 1.96.

- 기호설명 -

Array : 측정량 Y 의 샘플 데이터를 오름차순으로 정렬한 배열

a : 직사각, 삼각, 사다리꼴 분포의 반 너비

b : 사다리꼴 분포의 위쪽 반 너비

$E(Y)$: 확률 변수 Y 의 기댓값

k : 포함 인자

F_X : 확률 변수 X 의 누적 분포 함수(cdf)

f_R : 0~1 사이의 값을 갖는 균일 분포의 확률 변수 R 의 확률 밀도 함수(pdf)

f_X : 확률 변수 X 의 확률 밀도 함수(pdf)

† Corresponding Author, fractals@kogas.or.kr

© 2014 The Korean Society of Mechanical Engineers

- h : 적합 MCM 수행 순번
- M : 측정량의 확률 변수값(난수) 생성 개수
- m : 불확도 성분의 개수
- $N(\mu, \sigma^2)$: 중심이 μ 이고 표준 편차가 σ 인 정규 분포
- n : 측정값의 개수(유효 자유도 $\nu = n - 1$)
- $O(M)$: 오더(order), 곧 크기 M 의 근방을 나타냄
- p : 신뢰의 수준 (공학에서는 보통 0.95)
- R : $U[0,1]$ 의 균일 분포 확률 변수
- r : $U[0,1]$ 의 균일 분포 확률 변수값(난수)
- r_1, r_2 : r 이 두 개일 때 1, 2로 구분한 것
- r_i : r 이 여럿일 때 i 번째 확률 변수값
- s : 실험 표준 편차 또는 표본 표준 편차
- $U[c,d]$: $c \sim d$ 까지의 균일 확률 분포, c, d 포함
- $U(c,d)$: $c \sim d$ 까지의 균일 확률 분포, d 불 포함
- u_c : 합성 표준 불확도
- X : 입력량의 확률 변수
- x : 입력량의 확률 변수값(난수)
- x_1, x_2 : x 가 두 개일 때 1, 2로 구분한 것
- Y : 측정량(출력량)의 확률 변수
- \underline{Y} : 확률 벡터, 곧 확률 변수 Y_i 를 여러 개 묶은 것
- y : 측정량의 확률 변수 Y 의 실현 값
- \bar{y} : 측정량의 평균값
- y_{low} : 신뢰의 수준 p %의 아래쪽 포함 구간
측정량 Y 의 기댓값이 0이면 확장 불확도
- y_{high} : 신뢰의 수준 p %의 위쪽 포함 구간
측정량 Y 의 기댓값이 0이면 확장 불확도
- z : 표준 정규 분포 $N(0, 1^2)$ 을 따르는 확률 변수값(난수)

그리스문자

- δ : 몬테카를로 시뮬레이션의 수렴 기준값
- ν : 자유도

1. 서론

서로 다른 국가에서 이루어지는 측정 결과를 쉽게 비교하기 위해, 국제표준화기구(ISO)는 “측정불확도 표현 지침서(Guide to the expression of uncertainty in measurement, GUM⁽¹⁾)”를 1993년에 발간하였다(1995년 개정, 2008년도에는 일부 내용

을 보충한 JCGM 100⁽²⁾이 발간됨). 이후 이 지침서에 따라 측정 불확도를 구하고 표현하는 추세 가 전 세계적으로 확산되었고, 이에 따라 우리나라도 GUM을 바탕으로 하는 KOLAS 체계를 2001년에 도입하여 산업이나 상업적 분야의 교정·시험에 적용해오고 있다.

GUM의 기본 원칙은 불확도 체계는 가능한 한 단순하게 하되, 불확도 평가는 정확하게 하는 것이다. 이에 따라 개별 불확도와 합성 불확도 평가는 기존보다 매우 단순화되었고, 단순화에 의해 발생하는 합성 표준 불확도(combined standard uncertainty, 이하 CSU)의 불확도는 확장 불확도 결정 시 포함인자(coverage factor)를 정규 분포일 때보다 크게 함으로써 보상한다. 합성 표준 불확도의 불확도가 발생하는 실제 원인은 A형 불확도 평가, 곧 통계적인 분석에 의한 평가 시 t-분포의 표준 편차를 고려하지 않은데서 비롯된다.

GUM 평가 방법의 독특한 점은 통계량 $(y-E(Y))/u_c(y)$ 의 확률 분포를 Welch-Satterthwaite⁽³⁻⁴⁾ 근사법을 사용하여 t-분포로 근사시킨 데 있다. 이렇게 함으로써 유효 자유도, 곧 불확도의 불확도를 나타내는 잣대가 나타나고 이 자유도를 통해 CSU의 불확도를 포함 구간(coverage interval) 또는 확장 불확도 결정 시 고려할 수 있게 된다. 통계량 $(y-E(Y))/u_c(y)$ 가 t-분포가 되기 위해서는 합성 분산(CSU의 제곱, u_c^2)의 확률 분포가 카이제곱 분포(chi-square distribution)이어야 하는데, 실제 합성 분산의 분포는 카이제곱 분포와는 다르다. 따라서 GUM에서는 Welch-Satterthwaite 근사법을 이용하여 합성 분산을 카이제곱 분포로 근사시킨다.

이러한 GUM의 불확도 평가 방법—엄밀히 말하면 Welch-Satterthwaite 근사법—이 적용되기 위해서는 반드시 전제되어야 하는 조건이 하나 있는데, 그것은 측정량(measurand) Y 의 확률 분포가 정규 분포이어야 한다는 점이다. 이 조건은 중심 극한 정리⁽⁵⁾(central limit theorem)에 의해 대부분의 측정량의 불확도 모형에서 만족된다. 중심 극한 정리를 대략적으로 말하면, 많은 수의 독립 확률 변수(불확도 기여도)를 더하면, 그 분포는 정규 분포에 근접한다는 것이다. 따라서 Taylor 급수의 1차 도함수 항만으로 근사시킨 측정량의 불확도 모형(식 (1))에서 측정량 Y 는 대부분의 경우 정규 분포를 따르게 된다. 여기서 X_m

은 입력량을 나타내고, c_m 은 감도계수 $\partial Y/\partial X_m$ 을 나타낸다.

$$Y - E(Y) \approx c_1(X_1 - X_{1,o}) + \dots + c_m(X_m - X_{m,o}) \quad (1)$$

하지만 GUM의 불확도 평가 체계에는 두 가지 문제가 있다. 첫째는 측정량의 확률 분포가 정규 분포가 아닌 경우 GUM 방법을 적용할 수 없는 것이고, 둘째는 확장 불확도를 산출할 때 측정량 Y 의 가정된 확률 분포, 곧 근사된 t -분포를 사용하는 것이다. CSU는 측정량과 관련된 모든 불확도 기여도를 불확도 전파 법칙(law of propagation of uncertainty)을 통해 그대로 전달 받는다. 하지만 측정량의 확률 분포는 그렇지 않아서, 확장 불확도 산출 시 카이제곱으로 근사된 합성 분산의 확률 분포를 이용하여 측정량의 확률 분포를 추정하게 되는 것이다. 후자가 문제 되는 까닭은 확장 불확도 또는 포함 구간이 과소평가되기 때문이다. 이렇게 되는 이유는 Welch-Satterthwaite 방법으로 유효 자유도를 구할 때 A형 불확도의 자유도는 매우 작아 불확도의 불확도가 상당히 크지만, 일반적으로 B형 불확도—곧 통계분석인 아닌 방법으로 구한 불확도—가 합성 표준 불확도의 크기를 지배하고 자유도 또한 매우 크게 설정되기 때문에 결과적으로 유효 자유도가 커져서 A형 불확도의 불확도가 과소평가되기 때문이다. 이러한 두 가지 문제는 측정량의 정확한 확률 분포를 몰라서 생기는 문제이므로, CSU의 경우와 마찬가지로, 측정량의 확률 분포를 확률 분포 전파(propagation of distribution, PoD) 방법으로 구하면 풀리게 된다.

측정량의 확률 분포를 구하는 방법으로는 분포 함수를 이용 방법과 난수를 이용하는 방법 두 가지를 들 수 있다. 분포 함수 방법이란, 확률 변수들의 분포 함수를 컨볼루션(convolution)하여 구하는 것을 말하는데 이렇게 할 수 있는 까닭은 측정량 Y 의 불확도 모형을 식 (1)처럼 덧셈 꼴로 나타낼 수 있기 때문이다. 이를 설명하기 위해 식 (1)을 간략히 나타내면 식 (2)와 같다.

$$Y = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_m \quad (2)$$

여기서 Y_1, \dots, Y_m 은 서로 독립인 불확도 기여도, 곧 입력량의 불확도에 감도계수를 곱한 것을 나타내며 확률론적으로는 확률 변수(random variable)이다. 그리고 식 (2)는 확률 벡터—곧 확

률 변수를 여러 개 묶은 것—의 1차 선형 변환에 해당하므로, 이 선형 변환 식을 Y 에 대하여 풀고 적분하면 식 (2)의 확률 변수의 덧셈은 식 (3)과 같이 컨볼루션으로 표현된다.

$$f_{X_1+X_2}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_1}(x-t)f_{X_2}(t)dt$$

$$f_{X_1+\dots+X_N}(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{X_2+\dots+X_{N-1}}(x-t)f_{X_N}(t)dt \quad (3)$$

그런데 해석적으로 측정량의 확률 분포를 알아낼 수 있는 경우는 분포 함수가 직사각 분포나 삼각 분포와 같이 비교적 단순한 경우이다. 수치해석적 방법을 사용하더라도 컨볼루션이 진행됨에 따라 분포 함수가 매우 복잡해져서 분포 함수를 정의하는 것 자체가 어렵다. 따라서 많은 수의 확률 분포를 합성하는 경우 합성되는 확률 분포는 컨볼루션이 아닌 다른 방법으로 구해야 하며, 대표적인 방법으로는 난수를 이용하는 몬테카를로 방법⁽⁶⁾(Monte Carlo Method, MCM)을 들 수 있다. MCM을 이용한 확률 분포의 계산은 이미 다양한 분야에 도입되어 사용되고 있어서 새로운 것이 없지만, 아직까지 우리나라 교정 체계에 거의 들어와 있지 않아 교정 분야에 맞춤형으로 도입할 필요가 있으며 또 본 공사의 천연가스 유량계 교정센터의 국제 인증(국제도량형국(BIPM)에 등재 예정)에 반드시 필요하여 MCM을 이용한 정형화된 불확도 해석 프로그램을 개발하고 GUM 방법의 결과와 비교하였다.

2. 이 론

2.1 몬테카를로 방법 개요

불확도 해석에서 MCM이란, 각 불확도 성분의 확률 분포에 맞는 확률 변수값(난수)을 생성하고, 측정량의 불확도 모형에 따라 확률 변수값을 합성한 후, 그 확률 분포와 모수(parameter)—곧 기댓값, 합성 표준 불확도, 포함 구간 그리고 포함인자—를 구하는 것을 말하며, 그 절차를 요약하면 다음과 같다.

① 각 불확도 성분의 확률 분포에 맞는 확률 변수값을 한 개씩 생성하고, 측정량의 불확도 모형에 따라 합성한 후, 그 값을 메모리(배열)에 저장한다. 이러한 과정은 측정량의 확률 분포가 신뢰성 있게 구해질 수 있을 만큼 충분히 반복되어야 한다.

② 측정량의 확률 변수값 배열(array)을 오름차순으로 정렬(sorting) 한다.

③ 정렬된 측정량의 확률 변수값 전체 구간을 분할(partition)하고, 각 분할별로 도수를 계산한 후, 1로 노말라이징한 확률 밀도 함수(probability density function, pdf)를 만든다.

④ 오름차순으로 정렬된 측정량의 확률 변수값으로부터 합성 표준 불확도와 원하는 신뢰 수준에 해당하는 포함 인자 그리고 포함 구간을 구한다.

2.2 난수 발생기

MCM 방법을 구현하기 위해서는, 기본적으로, 0~1 사이의 난수를 발생시키는 유사 난수 발생기(pseudo-random number generator)가 필요하다. C 언어나 베이직 언어에서 제공되는 난수 함수는 단일 초기 값(seed)을 이용하여 선형 합동법으로 난수를 생성하므로, 발생된 난수들 간에는 상관관계가 존재하고 난수 주기가 짧아 MCM 방법에 적용하기 어렵다.⁽⁷⁾ 현재까지 개발된 양질의 난수 발생기는 백여 가지가 넘는데, 이들 대부분은 컴퓨터 언어에 16진수 연산자가 없으면 난수 생성 시간이 너무 길다는 문제가 있다. 따라서 베이직 언어를 사용한 본 연구에서는 이들 난수 발생기 중에서 16진수 연산자 없이도 난수를 빠르게 발생시킬 수 있는 L'Ecuyer⁽⁸⁾ 발생기를 사용하였다. 이 발생기의 한 가지 단점은, 난수 주기가 10¹⁸으로서, 다른 발생기에 비해 그 주기가 짧다는 점이지만, 본 연구에 적용하기에는 충분하여 이를 선택하였다.

2.3 확률 분포를 갖는 난수 생성 원리

불확도 해석에 나타나는 확률 분포는 대체로 5 가지 정도이다. 가장 기초적인 것이 자유도가 작은 t-분포와 대칭 직사각 분포이고, 개별 불확도 평가 단계에서 불확도 합성이 진행됨에 따라 대칭 삼각 분포와 대칭 사다리꼴 분포 그리고 정규 분포(또는 자유도가 큰 t-분포)가 나타난다. 그런데 난수 발생기는 [0,1]의 균일 분포 난수만을 생성하므로, 다양한 확률 분포의 확률 변수값을 만들기 위한 방법이 필요하다. 확률 변수값 생성 방법으로는 역변환법, 변수변환법, 거절법 그리고 합성법이 있다. 이들 중 가장 기본이 되는 역변환 방법 곧, 누적 분포 함수(cumulative distribution function, cdf)의 역함수를 이용한 방법으로

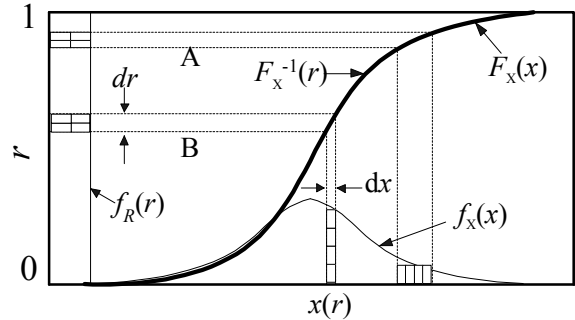


Fig. 1 Transformation method for generating a random number x from uniform distribution in r

확률 변수값 생성 원리를 설명하면 다음과 같다.

Fig. 1은 균일 분포로부터 정규 분포를 만드는 원리를 나타낸 것으로, $f_R(r)$ 는 균일 분포의 pdf - 곧 $f_R(r)=U[0,1]$ -를 나타내고, $f_X(x)$ 는 정규 분포의 pdf를 나타내며, $F_X(x)$ 는 $f_X(x)$ 의 누적 분포 함수를 나타낸다. 그리고 $F_X^{-1}(r)$ 는 r 축에서 $F_X(x)$ 를 바라봤을 때의 cdf, 곧 $F_X(x)$ 의 역함수이다. 그림에서 점선으로 된 기억자('ㄱ') 모양의 A, B 영역을 보면, r 축의 폭 dr 이 x 축에서는 변화되는 것을 볼 수 있다. A 영역에서는 dr 보다 dx 가 넓고, B에서는 그 반대이다. 이것이 의미하는 바를 설명하기 위해, $f_R(r)$ 의 전체 영역이 가로세로 둘 다 0.5인 벽돌 20 개로 채워져 있다고 가정을 하자. 그리고 A와 B 영역에서 dx 에 대한 dr 비를 각각 1/2, 2 이라고 하고 - 곧 $dr/dx=1/2, 2$ 라고 하고 - r 축의 $f_R(r)$ 에 2층으로 균일하게 쌓인 벽돌을 x 축으로 옮긴다고 하면, A의 경우는 1층으로 B의 경우는 4층으로 x 축 상에 재배치 될 것이다. 이러한 방법, 곧 $f_R(r)dr/dx$ 방법으로 $f_R(r)$ 의 벽돌을 x 영역에 모두 재배치하고 나면, x 축의 pdf인 $f_X(x)$ 를 얻게 된다. 이로부터 식 (4)가 성립하는 것을 알 수 있고(식 (4)는 확률론의 바탕을 이루는 근본 명제 중에 하나임⁽⁵⁾) 이를 적분한 후 역함수를 구하면 r 과 x 간의 변환 규칙인 식 (5)를 얻게 된다. 여기서 식 (5)가 성립하려면 $F_X(x)$ 가 강단조 함수 - 곧 일대일 대응 함수 - 이어야 하는데, 모든 cdf는 강단조 함수이므로 역함수가 존재한다.

$$f_R(r)dr = f_X(x)dx \tag{4}$$

$$r = \int_0^x f_X(x)dx = F_X(x) \rightarrow x = F_X^{-1}(r) \tag{5}$$

2.4 확률 변수값 생성 방법

정규 분포 $N(0, \sigma^2)$ 를 갖는 확률 변수값을 역 변환법으로 구하면 식 (6)과 같다. 그런데 이 식의 문제는 erf^{-1} 의 복잡성 때문에 확률 변수값 생성에 시간이 오래 걸린다는 점이다. 이 때문에 정규 분포의 확률 변수값 생성에는 빠른 알고리즘인 Box-Muller^(9,10) 변환 방법이 흔히 쓰인다. Box-Muller 변환의 기본 식은 (7), (8)과 같으며 이 중 하나를 선택하여 사용하면 된다.

$$x = F_X^{-1}(r) = \sigma \sqrt{2} \operatorname{erf}^{-1}(2r - 1) \quad (6)$$

$$x_1 = \sigma \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2) \quad (7)$$

$$x_2 = \sigma \sqrt{-2 \ln r_1} \sin(2\pi r_2) \quad (8)$$

t-분포의 난수 발생 방법은 기본적으로 정규 분포의 방법을 따르지만, 자유도를 갖기 때문에 정규 분포의 난수 발생 방법을 변형하여 사용하며 식 (9)와 같다.⁽¹¹⁾

$$x = s/\sqrt{n} \cdot z/\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{\nu} z_i^2\right)/\nu} \quad (9)$$

여기서 ν 는 자유도, $\sum_{i=1}^{\nu} z_i^2$ 은 자유도가 ν 인 카이제곱 난수, 곧 표준 정규 분포 $N(0, 1^2)$ 의 난수들을 제곱하여 합한 것을 나타내며, s/\sqrt{n} 는 A형 표준 불확도이다. 이 방법은 자유도가 낮을 때는 난수 생성 속도에 문제가 없지만, 자유도가 높을 때는 난수 생성 속도가 매우 느리므로 높은 자유도에 대해서는 GUM Sup. 1⁽¹⁰⁾에 있는 방법을 쓰는 것이 좋다.

대칭 삼각 분포와 대칭 사다리꼴(이하 대칭 생략)의 확률 분포는 합성법으로 쉽게 생성할 수 있다. 이 방법을 설명하기 전에, 먼저 임의의 너비를 갖는 직사각 분포의 확률 변수값 생성에 대하여 설명하면 다음과 같다. 직사각 분포는 $U(0, 1)$ 의 난수로 쉽게 만들 수 있는데, 이 방법은 역변환법에 해당하므로 직사각 분포의 역변환을 나타내면 식 (10)과 같다.

$$x = F_X^{-1}(r) = 2 \cdot ar - a \quad (10)$$

여기서 a 는 직사각 분포의 반 너비를 나타내고 $-a$ 를 더해준 것은 중심을 영(0)으로 만들기 위함이다.

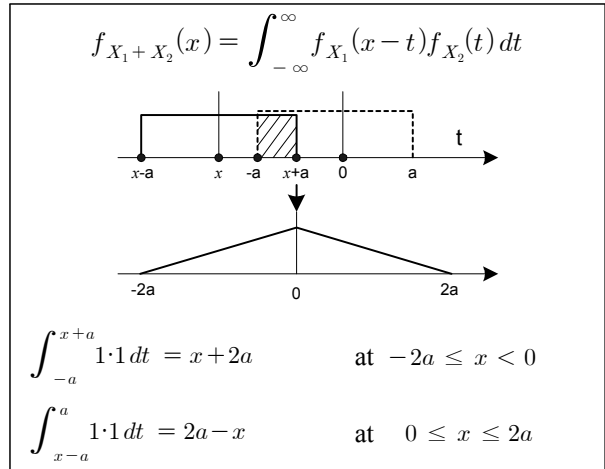


Fig. 2 Convolution of two rectangular distributions

삼각 분포와 사다리꼴 분포는 직사각 분포의 확률 변수를 더하여 만들 수 있다. 그 이유는, 서론에서도 언급한 바와 같이, 서로 독립인 확률 변수를 더한 것은 수학적으로는 콘볼루션이고, 콘볼루션의 특징은 임의의 모양을 갖는 함수의 폭을 넓게 하고 정규 분포로 근접시키기는 성질이 있기 때문이다. Fig. 2는 반 너비가 a 인 직사각 함수 두 개를 콘볼루션한 것을 나타낸다. 두 함수의 콘볼루션은 둘 중 하나의 함수를 거울 반사시키고 반사된 함수를 $-\infty \sim +\infty$ 진행하면서 두 함수의 겹치는 면적을 진행 함수 중심의 위치별로 나타낸 것이다. 따라서 반 너비가 같은 두 직사각 함수를 콘볼루션하면, Fig. 2에 나타낸 바와 같이, 삼각 분포 함수가 되며 그 반 너비는 두 배가 된다. 이러한 콘볼루션 관계는 확률 변수 간에는 정확히 덧셈이므로, 반 너비가 a 이고 중심이 영(0)인 삼각 분포의 확률 변수값은 반 너비가 $a/2$ 인 동일한 직사각 분포를 갖는 확률 변수 두 개를 더하여 만들 수 있다(식 (11) 참조).

$$x = \left[2 \cdot \left(\frac{1}{2}a \right) r_1 - \frac{1}{2}a \right] + \left[2 \cdot \left(\frac{1}{2}a \right) r_2 - \frac{1}{2}a \right] \quad (11)$$

사다리꼴의 분포는 반 너비가 서로 다른 직사각 분포의 확률 변수를 더하면 만들 수 있다. 중심이 영(0)이고 아래쪽 반 너비가 a 이며 위쪽 반 너비가 $b(a > b)$ 인 사다리꼴 분포의 확률 변수값은 식 (12)를 이용하여 만들 수 있다.

$$x = \left[2 \cdot \frac{(a+b)}{2} r_1 - \frac{(a+b)}{2} \right] + \left[2 \cdot \frac{(a-b)}{2} r_2 - \frac{(a-b)}{2} \right] \quad (12)$$

2.5 모수 계산 방법

측정량 Y 의 모수, 곧 평균(기댓값)과 합성 표준 불확도와 포함 구간 그리고 포함 인자는 오름차순으로 정렬된 M 개의 y 값 샘플링 집합으로부터 직접 구할 수도 있고 pdf로부터 구할 수도 있다. 여기서는 계산 시간이 빠른 전자에 대해서 설명하기로 한다. 먼저, 평균과 합성 표준 불확도는 통계 방법으로 구하며 이를 수식으로 나타내면 (13), (14)와 같다.

$$\bar{y} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M y_i \quad (13)$$

$$u_c(\bar{y}) = \sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{i=1}^M (y_i - \bar{y})^2} \quad (14)$$

측정량 Y 의 p %의 포함 구간(coverage interval)은 아래쪽과 위쪽으로 구분하는데, 아래쪽 포함 구간 y_{low} 와 위쪽 포함 구간 y_{high} 는 각각 식 (15), (16)으로 구한다.⁽¹⁰⁾ 여기서 Y 의 기댓값을 0으로 놓으면, 이들 두 포함 구간의 절댓값은 확장 불확도가 된다.

$$y_{low} = Array\left(\frac{M(1-p)}{2}\right) \quad (15)$$

$$y_{high} = Array\left(\frac{M(1+p)}{2}\right) \quad (16)$$

식 (15), (16)에서 *Array*는 오름차순으로 정렬된 컴퓨터 프로그램의 배열을 나타내고, 괄호 안의 문자는 배열의 번호를 나타낸다. 그리고 포함 인자(coverage factor) k 는 식 (17)과 같이 구한다.

$$k = \frac{|y_{high} - y_{low}|}{2u_c} \quad (17)$$

2.6 수렴 기준 설정 방법

덧셈 꼴의 불확도 모형에서 측정량의 샘플 개수가 백만 개 정도이면 몬테카를로 시뮬레이션 결과의 유효 자릿수는 보통 두 자리 정도가 된다. 그러나 이것이 항상 보장되는 것이 아니어서, 유효 자릿수에 따른 시뮬레이션의 수렴 기준이 필요하다. 수렴 기준을 갖는 몬테카를로 방법을 적합 몬테카를로 방법(adaptive monte calro method)이라고 하며 수렴 기준값⁽¹⁰⁾ δ 를 설정하는 방법을 설명하면 다음과 같다.

먼저, 합성 표준 불확도 u_c 를 식 (18)처럼 지수

로 표현한다. 여기서 e_1 은 1과 9사이의 정수이고, ‘.’은 소수점을 나타내며, $e_2 \cdots e_N$ 은 나머지 숫자의 순열을 나타낸다. 그러면 수렴 기준은 식 (19)와 같이 표현된다. 이 식에서 *digit*는 시뮬레이션 결과의 유효 자릿수를 나타낸다. 보기를 들면, u_c 의 값이 1.23×10^{-1} 이고 시뮬레이션 결과의 원하는 유효 자릿수가 세 자리라면 δ 는 5×10^{-4} 이 된다.

$$u_c = e_1 \cdot e_2 e_3 \cdots e_N \times 10^l \quad (18)$$

$$\delta = \frac{1}{2} \frac{u_c}{e_1 \cdot e_2 e_3 \cdots e_N \times 10^{digit-1}} \quad (19)$$

일반적으로 불확도 평가 결과에 적용되는 유효 자릿수는 1 또는 2 자리 정도이나 GUM Sup. 1⁽¹⁰⁾에서 권고하는 유효 자릿수는 2.8자리로서 이에 해당하는 δ 를 식으로 나타내면 (20)과 같다.

$$\delta_{sup.1} = \frac{1}{2} \frac{u_c}{e_1 \cdot e_2 e_3 \cdots e_N \times 10^1 \times 5} \quad (20)$$

3. 몬테카를로 시뮬레이션 방법

3.1 시뮬레이션 절차

2장에 기술한 이론을 바탕으로 원하는 유효 자릿수의 결과를 얻기 위한 몬테카를로 시뮬레이션 절차를 설명하면 다음과 같다.

a) 시뮬레이션 결과의 유효 자릿수를 결정하고, 이에 맞는 수렴 기준 δ 를 계산한다. δ 의 계산에는 CSU가 필요하므로, GUM 방법으로 합성 표준 불확도를 프로그램 방법으로 구한다. 다만 A형 표준 불확도는 식 (21)과 같이 보정하여 적용한다.

$$u'_A = \sqrt{\frac{n-1}{n-3}} u_{A(GUM)} \quad (21)$$

b) 샘플링 개수 M 을 10^4 으로 한다.

c) MCM 수행 순번 h 를 1로 설정한다.

d) 각 불확도 성분의 확률 변숫값을 한 개씩 생성하고, 측정량 Y 의 불확도 모형에 따라 합성한 후 배열에 저장한다. 이러한 과정은 M 번 반복한다.

e) 측정량의 확률 변숫값 배열을 오름차순으로 정렬한다.

f) 정렬된 배열을 이용하여 $\bar{y}^{(h)}$, $u_c(\bar{y}^{(h)})$,

$y_{low}^{(h)}, y_{high}^{(h)}$ 를 계산한다.

g) 만약 $h=1$ 이라면, h 를 1만큼 증가시키고 절차 d)부터 반복한다.

h) h 개수만큼 구한 측정량의 평균값들 $\bar{y}^{(1)}, \dots, \bar{y}^{(h)}$ 의 표준 편차를 식 (22)와 같이 구한다.

$$s_{\bar{y}} = \frac{1}{h(h-1)} \sum_{t=1}^h (\bar{y}^{(t)} - \bar{y}) \quad (22)$$

$$\bar{y} = \frac{1}{h} \sum_{t=1}^h \bar{y}^{(t)}$$

i) 같은 방식으로 나머지 $u_c(\bar{y}^{(1)}) \dots u_c(\bar{y}^{(h)}), y_{low}^{(1)} \dots y_{low}^{(h)}, y_{high}^{(1)} \dots y_{high}^{(h)}$ 에 대한 표준 편차 $s_{u_c(\bar{y})}, s_{y_{low}}, s_{y_{high}}$ 를 구한다.

j) 만일 $2s_{\bar{y}}, 2s_{u_c(\bar{y})}, 2s_{y_{low}}, 2s_{y_{high}}$ 값 중 하나라도 δ 보다 크면, h 를 1만큼 증가시키고 절차 d)로 돌아간다.

k) 각 표준 편차의 2배수 모두가 수렴 기준보다 작으면, $h \times M$ 개의 측정량 샘플 데이터를 모두 합친 후 오름차순으로 정렬하고 이를 이용하여 $\bar{y}, u_c(y), y_{low}, y_{high}$ 를 구한다. 이 때 $M=h \times M$ 으로 놓고 푼다.

3.2 기타 필요 기법

MCM 방법을 쓰는 주요 이유 중의 하나는 측정량의 확률 분포를 확인하는 것이다. 따라서 3.1 절의 Adaptive MCM을 수행하기 전에, 먼저 $M=10^5$ 정도로 설정하고 MCM 시뮬레이션을 수행하여 측정량의 pdf를 구하는 과정이 필요하다.

측정량의 샘플링 개수는 그 확률 분포의 모양과 불확도 성분의 개수 그리고 요구되는 유효 자릿수에 따라 크게 달라지며, 그 범위는 $10^4 \sim 10^9$ 까지 넓게 분포한다. MCM 시뮬레이션에 소요되는 시간의 거의 대부분은 샘플 배열의 정렬에 있으며, 이에 소요되는 시간은 어떤 알고리즘을 쓰느냐에 따라 크게 달라진다.

정렬 알고리즘은 빠른 정렬(Quicksort) 방법이 적정하다. 평균적인 비교 횟수는 $O(M \log M)$ 으로서 다른 대부분의 정렬 방법에 비해 비교 회수가 작을 뿐만 아니라, 동일한 비교 회수를 갖는 다른 정렬 방법에 비해서도 매우 빠르다는 특징이 있다. 정렬 방법을 강조하는 까닭은 기본적으로 $10^5 \sim 10^7$ 개의 샘플 배열을 정렬해야 하기 때문

이다. 빠른 정렬 방법을 쓰더라도 한 가지 문제가 남는데, 그것은 샘플 수가 10^8 을 넘으면 정렬 시간이 매우 길어질 뿐만 아니라 32 bit 컴퓨터의 경우 메모리 제한을 받게 된다는 점이다. 이 경우에는, $h \times M$ 개의 측정량의 샘플 대신, h 개의 $\bar{y}^{(h)}, u_c(\bar{y}^{(h)}), y_{low}^{(h)}, y_{high}^{(h)}$ 데이터를 평균하여 $\bar{y}, u_c(y), y_{low}, y_{high}$ 를 구해도 3.1절의 절차 i)로 구한 값과 거의 차이가 나지 않는다.

4. 시뮬레이션 결과

4.1 시뮬레이터 검증

Fig. 3은 개발된 MCM 시뮬레이션 프로그램으로서 본 공사의 교정 프로그램 DB(CALSOLVER)에 구현한 것이다. 사용자 인터페이스는 엑셀이고 베이직으로 프로그램 하였다. 입력할 수 있는 확률 변수는 15 개까지이고 그래픽 출력은 입력 변수의 pdf와 합성된 pdf 세 가지 - 곧 측정량, 합성 분산, 합성 표준 불확도 - 중 하나를 선택적으로 출력할 수 있다. 아울러 CSU와 포함 구간 그리고 포함 인자도 출력한다.

MCM 시뮬레이션에서는 보통 백만 개 이상의 확률 변수값을 사용하므로, 확률 변수값이 해당 분포를 따르는 지에 대한 별도의 검증은 거의 필요하지 않다. 따라서 본 연구에서는 MCM에 사용된 난수 발생기의 안정도(stability)와 MCM 결과의 정확도만을 확인하였다.

Table 1은 L'Ecuyer 난수 발생기의 안정도를 시험한 결과로서, 4가지 확률 분포에 대하여 신뢰의 수준 95 %에 해당하는 포함 구간(coverage interval, ci) 값을 연속해서 5 번 시험한 것이며 사용된 난수 개수(M)는 10^6 개이다. 결과를 보면 정규, 직사각 그리고 삼각 분포일 때는 포함 구간의 값이 소수점 둘째 자리까지 전혀 변동이 없

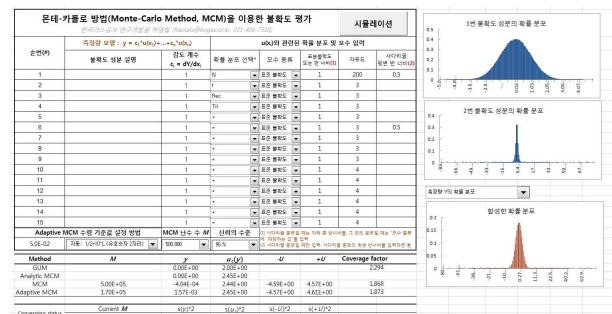


Fig. 3 Simulation program for Monte carlo method

Table 1 The test results for stability of L'Ecuyer random number generator

No.	$N(0,1^2)$	$R(0,1^2)$	$T(0,1^2)$	$t_{\nu=5}(0,1^2)$
1	1.96	1.65	1.90	2.56
2	1.96	1.65	1.90	2.57
3	1.96	1.65	1.90	2.57
4	1.96	1.65	1.90	2.57
5	1.96	1.65	1.90	2.58

N: normal, *R*: rectangular, *T*: triangular $t_{\nu=5}$: student's t with $\nu=5$; $(0,1^2)$: 0 denotes average, 1^2 denotes variance, $M=10^6$

Table 2 The test results for the accuracy of MCM simulator

Condition pdf	<i>M</i>	Analytic		MCM	
		<i>u</i> (<i>y</i>)	ci	<i>u</i> (<i>y</i>)	ci
$N(0,1^2)$	2.99×10^7	1.000	1.960	0.9999	1.960
$R(0,1^2)$	3.89×10^6	1.000	1.645	1.000	1.645
$T(0,1^2)$	1.21×10^7	1.000	1.902	1.000	1.902
$t_{\nu=5}(0,1^2)$	1.09×10^8	1.291	2.571	1.291	2.571

는 것을 알 수 있다. 다만 t-분포의 경우에는 2.56~2.58까지 값이 변하는 것을 볼 수 있는데, 다른 난수 발생기⁽¹⁰⁾에서도 이 정도의 변동은 있는 것으로 확인되었다.

Table 2는 해석적으로 구한 값과 MCM으로 구한 값을 비교한 것이다. 샘플 개수 *M*은 유효 숫자가 4자리일 때의 값이고, 측정량의 불확도 모형은 식 (2)이며, 측정량 *Y*의 기댓값은 영(0)이다. 결과를 살펴보면 MCM의 결과와 해석적 결과가 정확히 일치하고 있는 것을 알 수 있어서 MCM의 정확도에는 문제가 없는 것을 알 수 있다.

4.2 MCM과 GUM 결과 비교

MCM과 GUM의 결과 비교를 위해 Table 3과 같이 3가지 경우를 선정하였다. Case 1은 측정량의 확률 분포가 정규이고 t-분포의 A형 불확도가 없을 때이며, Case 2는 측정량의 확률 분포를 정규 분포로 판단하기 어려운 경우이다. 그리고 Case 3은 자유도 낮은 t-분포를 포함한 경우이다. 여기서 각 pdf 기호는 Table 1에 나타난 것과 같고, 다만 사다리꼴 분포를 나타내는 *Trap*에서만 0은 평균을, 2는 아래쪽 반 너비(다른 분포에서는 두 번째 숫자가 분산을 나타냄), 0.5는 위쪽 반 너비를 나타내는 것이 다르다. 그리고 측정량의

Table 3 The conditions for comparing GUM with MCM

Case 1	Case 2	Case 3
$N(0,1^2)$	$R(0,1^2)$	$N(0,8^2)$
$N(0,1^2)$	$R(0,2^2)$	$N(0,4^2)$
$N(0,1^2)$	$R(0,3^2)$	$N(0,1^2)$
$T(0,1^2)$	<i>Trap</i> (0,2,0.5)	$N(0,1^2)$
<i>Trap</i> (0,2,0.5)		$R(0,1^2)$
		$t_{\nu=3}(0,2^2)$

Table 4 The comparison results between GUM and MCM (three significant digits)

No. of case	Method	result*
1	GUM	$u_c = 2.17$ $ci = 4.25$
	MCM	$u_c = 2.17$ $ci = 4.25$ $cf = 1.96$
2	GUM	$u_c = 3.84$ $ci = 7.53$
	MCM	$u_c = 3.84$ $ci = 7.25$ $cf = 1.89$
3	GUM	$u_c = 9.33$ $ci = 18.3$
	MCM	$u_c = 9.75$ $ci = 19.0$ $cf = 1.95$
	GUM*	$u_c = 9.75$ $ci = 19.1$ $cf = 1.96$

* coverage factor is 1.96 at $\nu=\infty$

불확도 모형은 식 (2)를 사용하였다.

Table 4에는 Table 3의 세 가지 경우에 대하여 GUM과 MCM의 비교 결과를 나타내었다. 먼저 Case 1, 곧 측정량의 확률 분포가 정규이고 t-분포가 없을 때를 살펴보면, GUM과 MCM의 평가 결과가 정확히 일치하는 것을 볼 수 있다.

Case 2는 측정량의 확률 분포를 정규로 보는 것이 적정한지 판단하기 어려운 경우이다. CSU 값은 GUM과 MCM이 같은 반면, 포함 구간(ci)은 다소 차이가 나는 것을 볼 수 있다. 그 이유를 알아보기 위해 Fig. 4를 살펴보면, (a)에 나타난 측정량(measurand)의 확률 분포는 거의 정규로 보이는데 반해, (b)에 나타난 합성 분산의 확률 분포는 카이제곱 분포와 큰 차이를 보이고 있다. 물론, 합성 분산의 확률 분포가 정확히 카이제곱 분포가 아니기 때문에 다소 차이가 있겠지만, 그렇더라도 매끈한 모양의 카이제곱 분포와 유사해야 한다. 그러나 Case 2의 합성 분산의 확률 분

포는 그렇지 않은 것을 알 수 있다. 이로부터 정규 분포가 아닌 다른 분포들을 합성하는 경우 측정량의 확률 분포가 대략적으로 정규로 보이더라도 정규 분포가 아닌 경우가 있는 것을 알 수 있고, 이러한 경우 MCM은 정규 분포 여부를 정확히 판단해 줄 수 있을 뿐만 아니라 포함 구간 또한 정확히 산출할 수 있는 것을 알 수 있다. 이는 MCM이 측정량의 확률 분포를 그대로 사용하기 때문이다.

Case 3은 측정량의 확률 분포가 정규 분포를 따르지만 자유도가 낮은 t-분포, 곧 A형 표준 불확도가 있는 경우이다. Table 4에서 합성 표준 불확도를 비교해보면, GUM의 값은 9.33이고 MCM의 값은 9.75로서 다소 차이가 나고 포함 구간(c_i)도 각각 18.3, 19.0으로서 무시할 수 없는 차이가 나는 것을 알 수 있다(Fig. 5 참조). 이러한 차이의 원인은 A형 표준 불확도를 산출할 때 t-분포의 표준 편차를 고려하지 않은데 있다. 이를 확인하기 위해 A형 표준 불확도를 식 (23)⁽¹⁰⁾과 같이 t-분포의 표준 편차로 보정하고 포함 구간을 다시 계산하면 Table 4의 GUM*의 결과와 같이 되며, 이 포함 구간을 MCM의 결과와 비교해보면 서로 거의 일치하는 것을 알 수 있다.

$$u_A' = \sqrt{\frac{n-1}{n-3}} \frac{s}{\sqrt{n}} = \sqrt{\frac{n-1}{n-3}} u_A \quad (23)$$

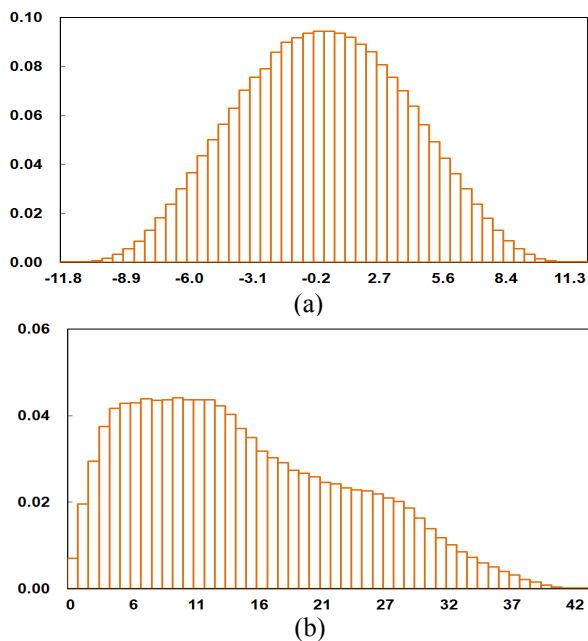


Fig. 4 pdf of Case 2 : (a) pdf of measurand, (b) pdf of combined variance

GUM의 A, B형 표준 불확도 평가에서 B형 표준 불확도는 그 확률 분포의 표준 편차로 하는데 반해, A형 표준 불확도에서는 측정값의 확률 분포 곧, t-분포의 표준 편차를 적용하지 않는다. GUM 방법에서는 A형 표준 불확도와 t-분포로 보정된 A형 불확도의 차이를 ‘불확도의 불확도’로 간주하며, 이 불확도는 포함 구간 산출 시 유효 자유도를 도입하여 t-분포 표로 보정하는 방법을 쓴다. 그런데 일반적으로 B형 표준 불확도는 A형에 비해 상당히 크고 자유도도 매우 크므로, CSU의 유효 자유도는 매우 크게 평가되고 이로 인해 A형 표준 불확도의 불확도는 대부분이 무시되게 된다. 그러나 식 (23)과 같이 A형 표준 불확도를 산출한다면 이러한 포함 구간의 저평가 문제는 사라지게 된다. 이 경우 흥미로운 사실이 하나 발견되는데, 그것은 포함 인자 값이 1.96에 매우 근접해 있다는 점이다(MCM 결과 참조). 실제로 MCM 방법으로 불확도 기여도 개수에 따라 포함 인자를 계산해 보면, Table 5에 나타난 바와 같이, 1.94~1.96 범위에 있는 것을 알 수 있으며 이로부터 t-분포의 표준 편차로 보정한 A형 불확

Table 5 Coverage factor with the number of random variables (three and half significant digits)

No	pdf	No.	$T(0,1^2)$	sum	cf
1	$N(0,1^2)$	7	$T(0,2^2)$	1-4	1.941
2	$N(0,1^2)$	8	$T(0,2^2)$	1-6	1.945
3	$R(0,1^2)$	9	$T(0,2^2)$	1-8	1.950
4	$t_{\nu=4}(0,1^2)$	10	$N(0,2^2)$	1-10	1.955
5	$R(0,1^2)$	11	$N(0,2^2)$	1-12	1.959
6	$R(0,1^2)$	12	$N(0,6^2)$		

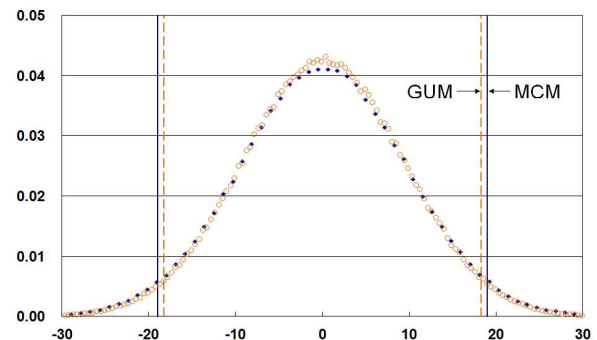


Fig. 5 Comparison of confidence intervals between GUM and MCM for case 3

도를 GUM에 적용할 경우 합성 분산의 유효 자유도는 불확도 평가에 불필요함을 알 수 있다.

전술한 문제로 인해 현재 BIPM 산하의 작업 그룹 2(WG 2, GUM 보급과 개정 담당)에서는 A형 표준 불확도를 식 (23)과 같이 변경하는 것에 대한 논쟁이 있는 것으로 알려져 있다. 사실 Case 3의 GUM과 MCM의 결과의 차이는 BIPM에서 신속히 해결해야 하는 숙제이기도 하다. 왜냐하면 MCM 방법도 GUM의 체계에 포함되기 때문에, 다시 말해, GUM 보충서 1로 되어 있기 때문에 두 방법 간의 유의미한 차이는 서로 모순되기 때문이다.

5. 결 론

ISO GUM의 불확도 평가 방법을 보완하기 위해 MCM 이론을 불확도 평가에 맞도록 맞춤형으로 정리하고, MCM을 적용한 프로그램을 개발하였다. 그리고 MCM과 GUM의 평가 결과를 비교를 하였으며 그 결과를 요약하면 다음과 같다.

(1) GUM 방법이 적용될 수 없는 경우, 곧 측정량의 확률 분포가 정규 분포가 아닌 때에도 MCM 방법은 정확한 포함 구간을 제공할 수 있다.

(2) 측정량의 확률 분포를 정규 분포로 판단하기 어려운 경우 또는 측정량의 확률 분포를 알더라도 정규인지 판단하기 어려운 경우, MCM을 이용하면 정규 분포 여부를 정확히 판단할 수 있다. 판단 방법은 합성 분산의 확률 분포가 카이 제곱 분포와 유사한 지를 확인하는 것이다.

(3) A형 불확도가 불확도 평가에 포함된 경우, GUM 방법은 일반적으로 포함 구간을 다소 작게 평가하게 되는 것을 알 수 있었고, 이러한 저평가 문제는 A형 표준 불확도에 t-분포의 표준 편차를 곱해 주면 사라지는 것을 알 수 있었다. 이럴 경우, CSU의 유효 자유도 계산은 불확도 평가에서 불필요하게 되며, 포함 인자는 1.96인 적절한 것도 알 수 있었다.

참고문헌 (References)

- (1) ISO GUM, 1993, "Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement," *International Organization for Standardization*, Geneva.
- (2) JCGM 100, 2008, "Evaluation of Measurement Data—Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement," BIPM.
- (3) Satterthwaite, F. E., 1946, "An Approximate Distribution of Estimates of Variance Components," *Biometrics Bulletin* 2, pp. 110-114.
- (4) Welch, B. L. 1947, "The Generalization of "Student's" Problem When Several Different Population Variances are Involved," *Biometrika* 34, pp. 28-35.
- (5) Park, C. H., 2004, "Random Processes," ISBN 89-7050-390-0.
- (6) Robert, C. P., Casella, G., 2005, "Monte Carlo Statistical Methods," Springer New York, ISBN 0387212396.
- (7) Hellekalek, P., 1998, "Good Random Number Generators are (not so) Easy to Find," *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 46, pp. 485-505.
- (8) James F., 1990, "A Review of Pseudorandom Number Generators," *Computer Physics Communications*, Vol. 60, pp. 329-344.
- (9) http://en.wikipedia.org/wiki/Box-Muller_transform.
- (10) JCGM 101, 2008, "Evaluation of Measurement Data—Supplement 1 to the "Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement"—Propagation of Distributions using a Monte Carlo Method," BIPM.
- (11) Gelfand, A. E. and Smith, A. F. M., 1990, "Sampling-Based Approaches to Calculating Marginal Densities," *The Journal of the American Statistical Association*, Vol. 85, pp. 398-409.