



# Физика и Метрология

В.И. Белоусов, И.И. Дегтярев, В.В. Ежела, О.В. Зенин  
Ю.В. Куянов, В.Н. Ларин, К.С. Луговский, С.Б. Луговский  
Ф.Ф. Тихонин, Н.П. Ткаченко

*Росатом, ОСССД, Центр данных физики частиц в ИФВЭ  
Протвино, Россия*

# Темы сообщения

## 1. Метрология и фундаментальная наука

- Необходимость и недостаточность метрологии в фундаментальных исследованиях.

## 2. Критика современной системы метрологического обеспечения научных исследований и процессов сохранения и передачи научных измерительных данных:

- в авторитетных научных журналах;
- в авторитетных инфоресурсах.

## 3. Предложения по исправлению ситуации :

- Стандарт числового представления многомерных измерительных данных;
- “Новая” форма электронных публикаций → Вычислительный Объект Знаний (ВОЗн);
- Пред-публикационная экспертиза качества числовых данных ВОЗн (**Numerical Peer Review**) .

**Измерение → ключ к познанию и использованию природы**  
**Качество данных → качество принимаемых решений**

**Метрология - научно-техническая дисциплина, призванная:**

- 1) **Аккумулировать и обобщать передовые методики ведения измерений в различных научных и технических направлениях, фундаментальных и прикладных (Достижение требуемой точности при разумных затратах).**
- 2) **Разрабатывать:**
  - **Единый язык описания методов и результатов измерений (Обеспечение возможности коммуникаций разных научно-технических сообществ)**
  - **Методики и рекомендации по использованию измерительных данных в прогнозировании реализуемости и безопасности новых проектов (Обеспечение выживаемости общества, экономия невозполняемых ресурсов)**
  - **Методики и рекомендации по использованию измерительных данных в системах мер по обеспечению и контролю качества продукции в производственной сфере (Обеспечение устойчивого развития общества, регулирование баланса восполняемых ресурсов)**

# НАУКА, МЕТРОЛОГИЯ, ПРАКТИКА

**НАУКА** ищет новые явления и их связи с уже известным знанием. Наука добывает измерительные данные для доказательства «теорем существования» новых явлений и слабо заботится о «метрологическом качестве» данных, необходимого для прикладного использования новых явлений на практике и в обучении.

Ученые стремятся к новым рубежам неизведанного и не имеют ни времени ни ресурсов для исчерпывающего исследования открытых ими явлений для будущего прикладного использования.

Однако при замыслах новых исследований ученые остро нуждаются в систематизированных и надежных данных для обоснования необходимости, реализуемости и безопасности новых исследований. Ученые вынуждены создавать свои Центры Данных.

**МЕТРОЛОГИЯ** не может предоставить ученым «горячие» данные просто потому, что данные в научных публикациях об открытиях новых явлений, как правило, фрагментарны и недостаточно надежны для прикладного использования.

Метрологи крайне редко проводят исследования «на границах изведанного» “по заказу”. Метрологи не имеют возможности разрабатывать методики ведения исследований и измерений гипотетических явлений.

Основная забота метрологов - это обеспечение единства измерений и должного качества измерительных данных об известных явлениях для их продуктивного и безопасного использования на практике.

Однако Метрологии необходимы новые методы измерений и данные, разрабатываемые и добываемые Наукой. Их освоение, обобщение и переработка в метрологические рекомендации и стандарты делают возможным использование новых явлений на практике, в обучении и в дальнейших научных поисках.

**ПРАКТИКЕ** (Индустрии и Образованию) также необходимы современные данные метрологического качества и особенно в области высоких технологий и потенциально опасных приложений.

Наука производит только малую часть данных достаточную для доказательства существования явлений и недостаточную для индустриального использования.

Метрология и Индустрия вынуждены создавать свои исследовательские лаборатории по расширению и уточнению знаний о новых явлениях для использования их в приложениях ( в том числе и в Науке).

Как видим, Фундаментальная Наука, Метрология, Индустрия и Образование тесно связаны. К сожалению, в их развитии почти нет системной синхронизации. Нам представляется, что организации **ISO** и **ICSU(IUPAP)** могут и должны выполнять роль синхронизаторов, используя имеющиеся у них планетарные метрологические и академические организационные структуры.

**There are at least four tightly intertwined areas of intellectual activities that appeared and surviving due to measurements and handling measured data:  
Science, Education, Metrology, and Industry**

**To coordinate the uniformity of measurements and measured data quality there exists the planetary intergovernmental metrological system governed by the following international organizations**

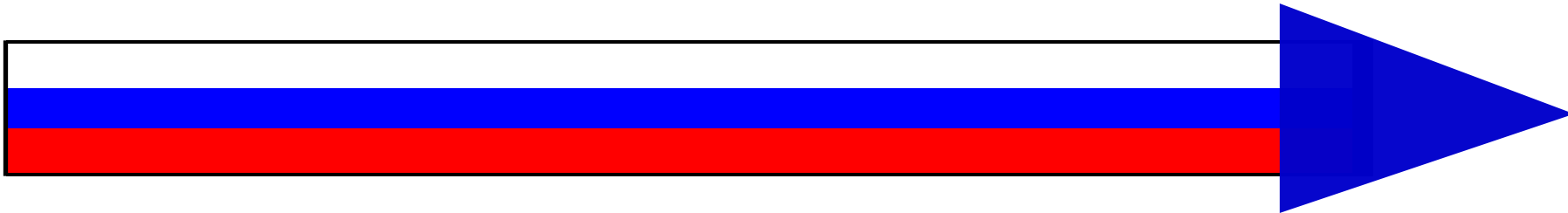
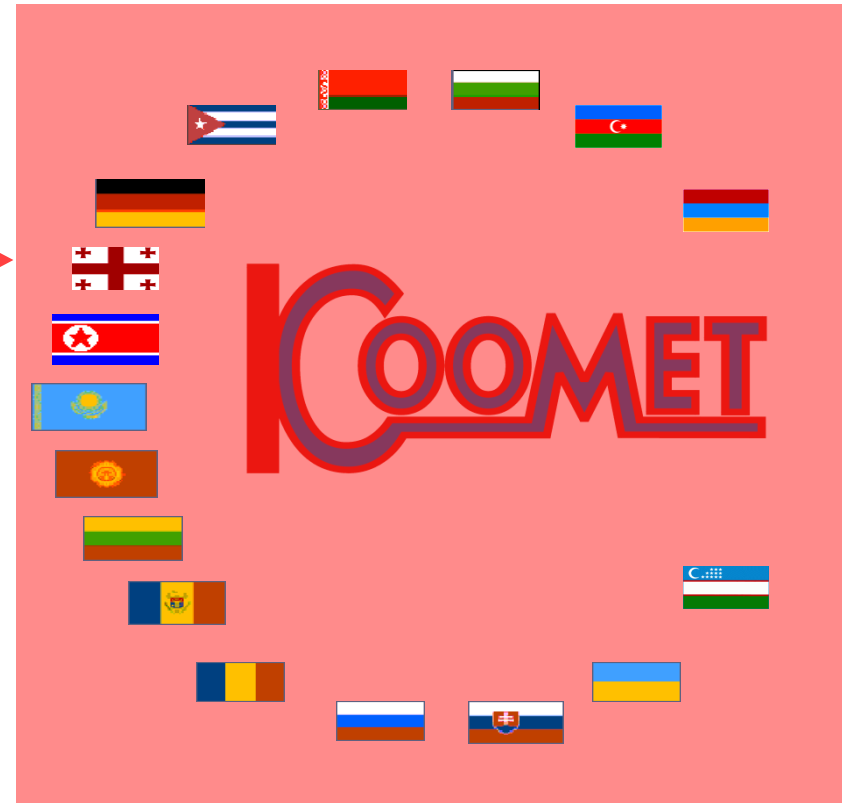


**Regional Metrological Systems**

**National Metrological Systems**

*Regional  
Metrology organizations*

From: "Metrology - in short"  
3-rd edition, 2008 by  
P. Howarth and F. Redgrave





R  
U  
S  
S  
I  
A

RF Government



Ministry of Industry & Energy



Federal Agency of Technical Regulation & Metrology



19 Federal Metrology Institutions (VNIIM, ■ ■ ■ )



COmmittee on  
DATA for Science  
and  
Technology

The mission of CODATA is to strengthen international science for the benefit of society by promoting improved scientific and technical data management and use.

R  
U  
S  
S  
I  
A

RAS

Council on Metrological  
Support and Standardization

Russian National CODATA  
Committee



RWG on FPC

RWG on EM



# ОДНАКО

Несмотря на непрерывный прогресс в:

- методиках измерений,
- совершенствовании измерительных систем,
- развитии систем обработки данных,

и увеличивающуюся вычислительную мощность,

мы все еще имеем устойчивую тенденцию

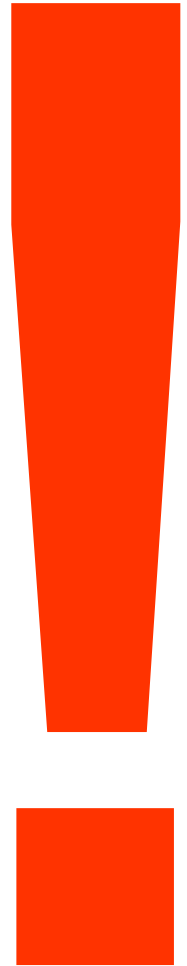
некорректного числового выражения

результатов измерений в научной литературе

и в электронных ресурсах данных,

рассматриваемых как эталонные:

**FCDC\_**, **AMDC\_**, **NNDC\_**, **PDG\_**



# The main sources of the corrupted data are:

- Over-rounding;
- Usage of IMPROPER UNCERTAINTY PROPAGATION LAWS;
- Absence of a NUMERICAL PEER REVIEW in the traditional and electronic publishing processes.

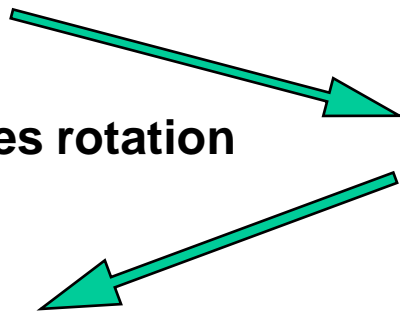
As a rule, published multivariate data are damaged by over-rounding !!!

## What is the over-rounding of multidimensional data?

Let us transform the “Greek” random vector with its scatter region

$$\begin{array}{|c|} \hline \zeta \\ \hline \eta \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline (\sqrt{2}) \cdot (1.500 & 0.100) \\ \hline (\sqrt{2}) \cdot (0.345 & 0.001) \\ \hline \end{array}, \quad r(\zeta, \eta) = \begin{array}{|c|c|} \hline 1.0 & 0.0 \\ \hline 0.0 & 1.0 \\ \hline \end{array}$$

by 45 degrees rotation



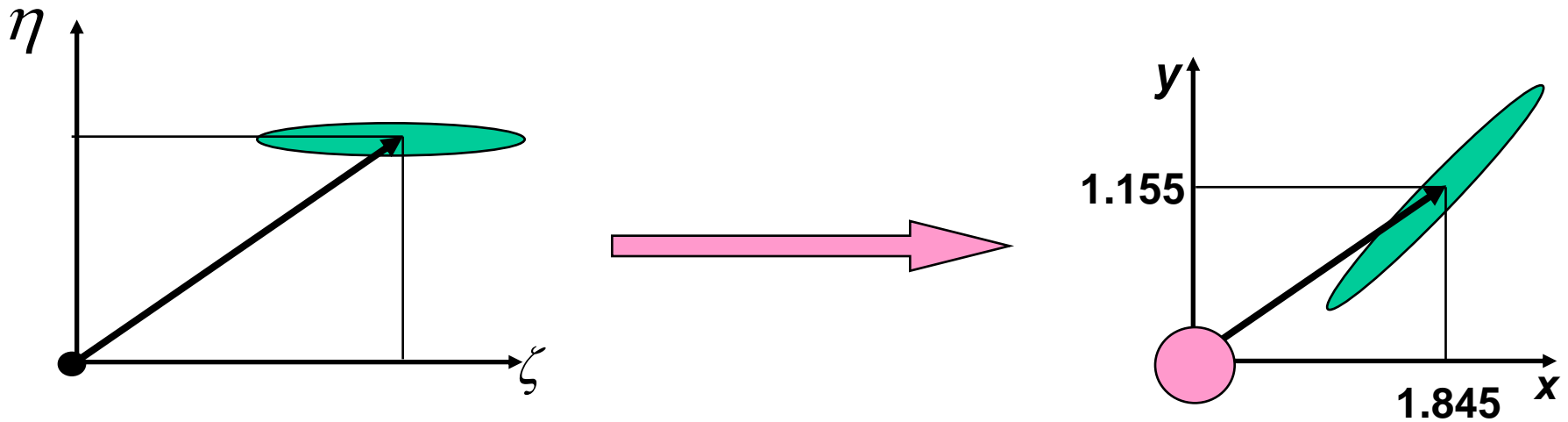
$$\begin{array}{|c|} \hline x = (\zeta + \eta) / (\sqrt{2}) \\ \hline y = (\zeta - \eta) / (\sqrt{2}) \\ \hline \end{array}$$

to the “Latin” vector

$$\begin{array}{|c|} \hline x \\ \hline y \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline 1.845 & 0.100 \\ \hline 1.155 & 0.100 \\ \hline \end{array}, \quad r(x, y) = \begin{array}{|c|c|} \hline 1.00000 & 0.9998 \\ \hline 0.9998 & 1.0000 \\ \hline \end{array}$$

# Let us recall how data could be corrupted in this simplest data transformation

## 1. True calculations, qualitatively true picture



$x = 1.845(100)$

$y = 1.155(100)$

mean(uncertainty)

1.0000

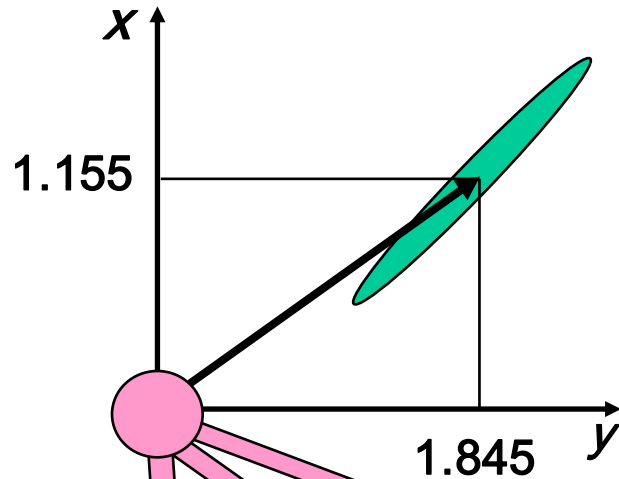
0.9998

0.9998

1.0000

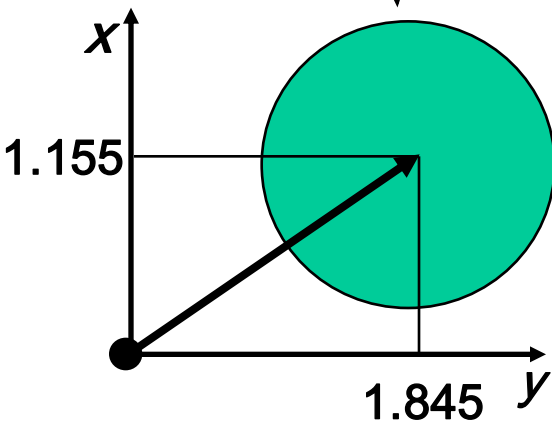
correlator

# All variants of correlated data corruption are copiously presented in scientific, educational, and technical resources

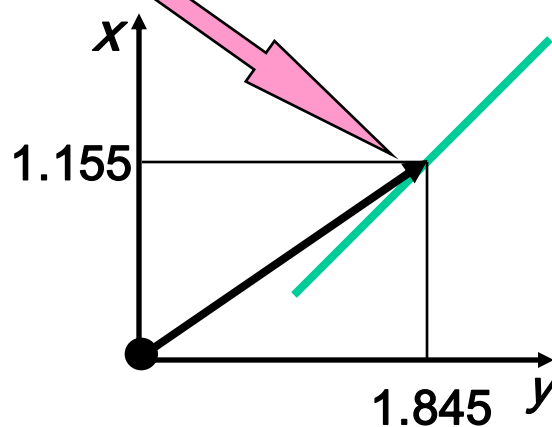


$x = 1.845(100)$		
$y = 1.155(100)$		
$x = 1.84(10)$		
$x = 1.8(1)$	1.0000	0.9998
$y = 1.16(10)$		
$y = 1.2(1)$	0.9998	1.0000

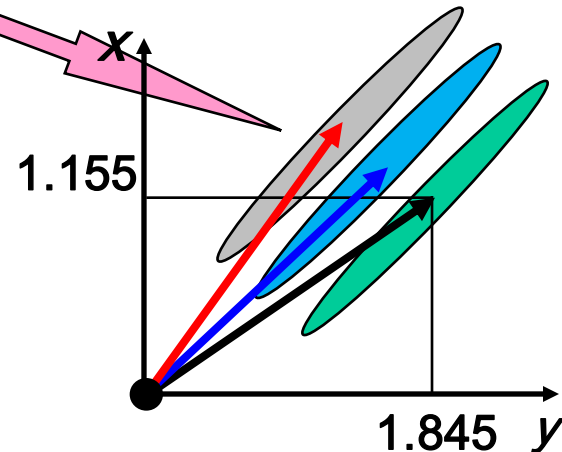
2. Correlator ignored



3. Correlator over-rounded



4. Mean vector over-rounded  
Scatter region moved



**Из утверждений спектральных теорем Вейля, Гершгорина и Шура можно получить простые оценки порогов безопасного округления матричных элементов матрицы корреляций, вектора средних значений и их стандартных отклонений**

**Для  
коррелятора**

$$A^C \geq A_{i \neq j}^{Cth} = \left\lceil \log_{10} \left( \frac{n-1}{2 \cdot \lambda_{\min}} \right) \right\rceil$$

**Для  
средних**

$$A_i^V \geq A_i^{Vth} = \left\lceil \frac{1}{2} \log_{10} \left( \frac{n}{4 \cdot \lambda_{\min} \cdot T_{CL}^2 \cdot \left( \frac{U_i}{\text{unit}_i} \right)^2} \right) \right\rceil$$

**Для  
стандартных  
отклонений**

$$A_i^U \geq A_i^{Uth} = \left\lceil \frac{1}{2} \log_{10} \left( \frac{n}{4 \cdot \lambda_{\min} \cdot T_{CL}^2 \cdot \left( \frac{U_i}{\text{unit}_i} \right)^2} \right) \right\rceil$$

$\lambda_{\min}$  — минимальное собственное число коррелятора,

$T_{CL}^2$  — «коэффициент охвата» области рассеяния.

# В нелинейных моделях измерений линейный перенос неопределенностей, как правило, “работает плохо”

$C_i, \{\delta C_a, \delta C_b\}$   
 / компонент



$F_k(C_i), \{\delta F_m, \delta F_n\}$   
 D компонент


$$\{\delta F_i, \delta F_j\} =$$

$$\sum_{k,l=1}^T \frac{1}{k!l!} \frac{\partial^k F_i}{\partial c_{\alpha_1} \dots \partial c_{\alpha_k}} \{\delta c_{\alpha_1} \dots \delta c_{\alpha_k}, \delta c_{\beta_1} \dots \delta c_{\beta_l}\} \frac{\partial^l F_j}{\partial c_{\beta_1} \dots \partial c_{\beta_l}}$$

Коррелятор  $\{\delta F_m, \delta F_n\}$  не вырожден и положительно определен если размерности  $\dim(C_i) = I$ ,  $\dim(F_k) = D$  и порядок приближения вектор функции  $F_k$  полиномами Тейлора, удовлетворяют неравенству:



$$D \leq \frac{(I+T)!}{I!T!} - 1$$



**Что предлагает  
законодательная  
метрология**



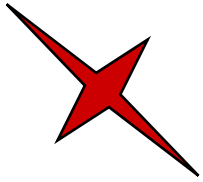
# Концепция развития

## национальной системы стандартизации

(одобрена распоряжением Правительства РФ от 28 февраля 2006 г. N 266-р)

### II. Стратегические цели, принципы и задачи развития национальной системы стандартизации

..... применение международных стандартов как основы разработки национальных стандартов, за исключением случаев, когда такое применение признано невозможным вследствие несоответствия требований международных стандартов климатическим и географическим особенностям Российской Федерации, техническим и (или) технологическим особенностям, а также случаев, когда Российская Федерация в соответствии с установленными процедурами выступала против принятия международного стандарта или отдельного его положения....



### ПРЕДОСТЕРЕЖЕНИЕ!

Необходима тщательная проверка всех рекомендаций из руководств и стандартов ISO. Там встречаются логические противоречия и проблемы с математикой.

[1.] **Guide for the Presentation in the Primary Literature of Numerical Data Derived from Experiments (CODATA Guide).**

CODATA Bulletin No.9, Dec.1973

[2.] **Uncertainty of measurement -- Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995)**

[BIPM](#), [IEC](#), [IFCC](#), [ISO](#), [IUPAC](#), [IUPAP](#), and [OIML](#) ISO/IEC Guide 98-3:2008

[3.] **U.S. Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (US GUM)**

ANSI/NCSL Z540.2-1997 (R2002)

[4.] **Measurement uncertainty revisited: Alternative approaches to uncertainty evaluation**, EuroLab, Technical Report No. 1/2007, March 2007

[2.1.] **Руководство по выражению неопределенности измерения (ВНИИМ GUM)** Перевод ISO GUM (ВНИИМ-1999)

[2.2.] **Применение “Руководства по выражению неопределенности измерения”**, РМГ 43 2001, Минск 2003

ГОСТ Р ИСО 5725: 1-6, 2002

[ISO 5725:1-6,1994/Cor 1:2001](#)

**Joint Committee for Guides on Metrology (JCGM)**

**Working Group on the GUM**

# JCGM Future Products

<u>ISO/IEC FDGuide 98-1</u> <b>Uncertainty of measurement — Part 1:</b> <b>Introduction to the expression of uncertainty in measurement</b>	<u>50.60</u>
<u>ISO/IEC NP Guide 98-2</u> <b>Uncertainty of measurement — Part 2:</b> <b>Concepts and basic principles</b>	<u>10.99</u>
• <u>ISO/IEC NP Guide 98-3</u> <b>Uncertainty of measurement — Part 3:</b> <b>Guide to the expression of uncertainty in measurement (revised GUM:1995)</b> <b>[GUM:95 withdrawn: Stage: <u>95.99</u> (2008-09-30)]</b>	<u>60.60</u>
<u>ISO/IEC Guide 98-3/Suppl 1</u> <b>1. Propagation of distributions using a Monte Carlo method</b>	<u>60.60</u>
<u>ISO/IEC Guide 98-3/NP Suppl 2</u> <b>2. Models with any number of output quantities</b>	<u>10.99</u>
<u>ISO/IEC Guide 98-3/NP Suppl 3</u> <b>3. Modelling</b>	<u>10.99</u>
<u>ISO/IEC NP Guide 98-4</u> <b>Uncertainty of measurement — Part 4:</b> <b>Role of measurement uncertainty in conformity assessment</b>	<u>10.99</u>
<u>ISO/IEC NP Guide 98-5</u> <b>Uncertainty of measurement — Part 5:</b> <b>Applications of the least-squares method</b>	<u>10.99</u>

# HOWEVER

**In spite of the mutual developments in Science, Metrology, Industry, and Education we still have a growing number of evidences that the current practice of knowledge generation, knowledge transfer, and knowledge preservation is obsolete and wasteful**



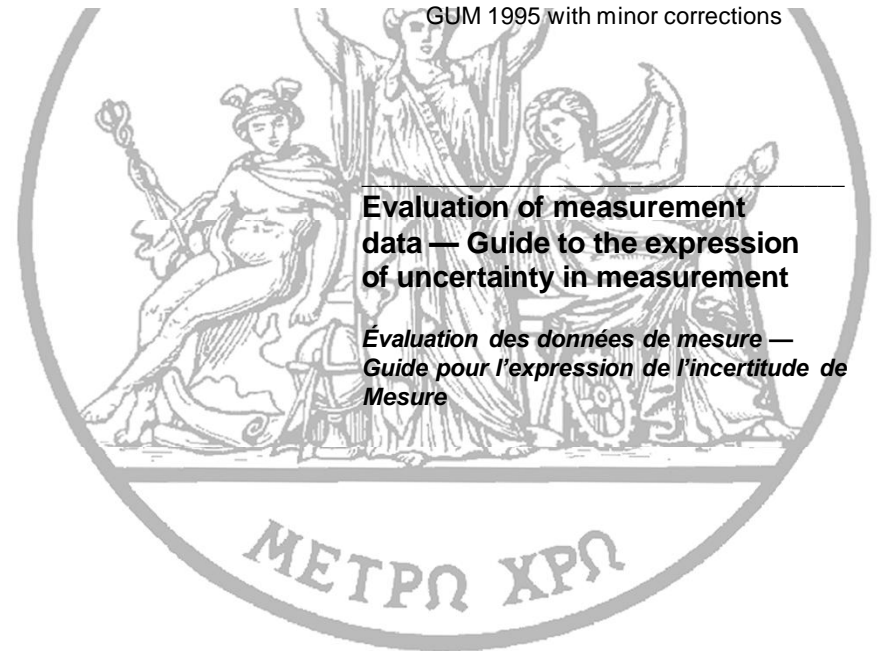
# GUIDE TO THE EXPRESSION OF UNCERTAINTY IN MEASUREMENT

CORRECTED AND REPRINTED, 1995

BIPM International Bureau of Weights and Measures  
IEC International Electrotechnical Commission  
IFCC International Federation of Clinical Chemistry  
ISO International Organization for Standardization  
IUPAC International Union of Pure and Applied Chemistry  
IUPAP International Union of Pure and Applied Physics  
OIML International Organization of Legal Metrology

JCGM 100:2008

GUM 1995 with minor corrections



First edition September 2008

© JCGM

**0.1** When reporting the result of a measurement of a physical quantity, it is obligatory that some quantitative indication of the quality of the result be given so that those who use it can assess its reliability. Without such an indication, measurement results cannot be compared, either among themselves or with reference values given in a specification or standard. **It is therefore necessary that there be a readily implemented, easily understood, and generally accepted procedure for characterizing the quality of a result of a measurement, that is, for evaluating and expressing its *uncertainty*.**



**3.1.7** This *Guide* treats the measurand as a scalar (a single quantity). Extension to a set of related measurands determined simultaneously in the same measurement requires replacing the scalar measurand and its variance (C.2.11, C.2.20, C.3.2) by a vector measurand and covariance matrix (C.3.5). **Such a replacement is considered in this *Guide* only in the examples (see H.2, H.3, and H.4).**





## Рекомендованная процедура оценивания и выражения неопределенностей (из [2.1. , 2.2.] )

1. Запись уравнения измерений  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$ , вычисление и внесение поправок.
2. Вычисление оценок  $x_i$  входных величин  $X_i$ .
3. Вычисление стандартной неопределенности и числа степеней свободы  $i$ -й входной величины:  $u(x_i)$  и  $\nu_i$ .
4. **Вычисление коэффициентов корреляции  $r(x_i, x_j)$ .**
5. **Определение результата измерений  $y = f(x_1, \dots, x_N)$ .**
6. Вычисление суммарной стандартной неопределенности измерений  $u_c(y)$ .
7. Вычисление расширенной неопределенности измерений  $U$ .
8. **Формирование документа с описанием процедуры и результата оценивания.**

**5.1.2** The combined standard uncertainty  $u_c(y)$  is the positive square root of the combined variance  $u_c^2(y)$ , which is given by

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^2 \cdot u^2(x_i) \quad (10)$$

where  $f$  is the function given in Equation (1). Each  $u(x_i)$  is a standard uncertainty evaluated as described in 4.2 (Type A evaluation) or as in 4.3 (Type B evaluation). The combined standard uncertainty  $u_c(y)$  is an estimated standard deviation and characterizes the dispersion of the values that could reasonably be attributed to the measurand  $Y$  (see 2.2.3).

Equation (10) and its counterpart for correlated input quantities, Equation (13), both of which are based on a first-order Taylor series approximation of  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$ , express what is termed in this *Guide* the law of propagation of uncertainty (see E.3.1 and E.3.2).

**NOTE** When the nonlinearity of  $f$  is significant, higher-order terms in the Taylor series expansion must be included in the expression for  $u_c^2(y)$ , Equation (10). When the distribution of each  $X_j$  is normal, the most important terms of next highest order to be added to the terms of Equation (10) are

$$\sum_{i,j=1}^N \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial^3 f}{\partial x_i (\partial x_j)^2} \right] \cdot u^2(x_i) \cdot u^2(x_j)$$

See H.1 for an example of a situation where the contribution of higher-order terms to  $u_c^2(y)$  needs to be considered.





В примечании к рекомендации 5.1.2 в формуле для вычисления вклада в комбинированную неопределенность от старших (второго порядка) членов разложения нелинейной функции от случайных нормальных величин члены с третьими производными введены по ошибке. Для некоторых нелинейных функций рекомендованная формула приводит к отрицательным значениям квадрата комбинированной неопределенности. В самом деле, рассмотрим функцию:

$$f(x) = 1 - x + 2x^2 + 3x^3 + 4x^4$$

от нормальной величины с нулевым средним и с дисперсией  $\sigma^2$  и вычислим комбинированную неопределенность по формулам 5.1.2.

$$\begin{aligned} u^2(f) &= \sigma^2 \cdot \left[ f'(0)^2 + \left( \frac{1}{2} f'''(0)^2 + f'(0) \cdot f''''(0) \right) \cdot \sigma^2 \right] = \\ &= \sigma^2 \cdot \left[ 1 + \left( \frac{1}{2} 16 - 18 \right) \cdot \sigma^2 \right] = \sigma^2 \cdot [1 - 10 \cdot \sigma^2] \end{aligned}$$

При  $\sigma^2 > 0.1$  мы получаем отрицательную комбинированную неопределенность для  $u^2(f)$ . Отметим, что этот факт остается незамеченным в метрологической литературе и после переиздания *Руководства* в 2008 году.

**ВЫВОД: Это примечание в 5.1.2 следует поправить**



**7.1.4** Although in practice the amount of information necessary to document a measurement result depends on its intended use, the basic principle of what is required remains unchanged: **when reporting the result of a measurement and its uncertainty, it is preferable to err on the side of providing too much information rather than too little.** For example, one should

- a) describe clearly the methods used to calculate the measurement result and its uncertainty from the experimental observations and input data;
- b) list all uncertainty components and document fully how they were evaluated;
- c) present the data analysis in such a way that each of its important steps can be readily followed and the calculation of the reported result can be independently repeated if necessary;
- d) give all corrections and constants used in the analysis and their sources.

A test of the foregoing list is to ask oneself “Have I provided enough information in a sufficiently clear manner that my result can be updated in the future if new information or data become available?”



**7.2.5** If a measurement determines simultaneously more than one measurand, that is, if it provides two or more output estimates  $y_i$  (see H.2, H.3, and H.4), then, in addition to giving  $y_i$  and  $u_c(y_i)$ , give the covariance matrix elements  $u(y_i, y_j)$  or the elements  $r(y_i, y_j)$  of the correlation coefficient matrix (C.3.6, Note 2) (**and preferably both**).

**7.2.6** The numerical values of the estimate  $y$  and its standard uncertainty  $u_c(y)$  or expanded uncertainty  $U$  should not be given with an excessive number of digits. **It usually suffices to quote  $u_c(y)$  and  $U$  [ as well as the standard uncertainties  $u(x_i)$  of the input estimates  $x_i$  ] to at most two significant digits, although in some cases it may be necessary to retain additional digits to avoid round-off errors in subsequent calculations.**

In reporting final results, it may sometimes be appropriate to round uncertainties up rather than to the nearest digit. For example,  $u_c(y) = 10,47 \text{ m}\Omega$  might be rounded up to  $11 \text{ m}\Omega$ . However, common sense should prevail and a value such as  $u(x_i) = 28,05 \text{ kHz}$  should be rounded down to  $28 \text{ kHz}$ . Output and input estimates should be rounded to be consistent with their uncertainties; for example, if  $y = 10,057\ 62 \ \Omega$  with  $u_c(y) = 27 \text{ m}\Omega$ ,  $y$  should be rounded to  $10,058 \ \Omega$ . **Correlation coefficients should be given with three-digit accuracy if their absolute values are near unity.**

# Over-rounding in the ISO GUM

“Annex H: Examples” clearly show the failure of 7.2.6 recommendation on rounding correlation matrices. Indeed, in the tables H.3 and H.4 correlation matrices are presented with three decimal digits to the right of decimal point as follows:

$$\begin{bmatrix} 1.000 & -0.588 & -0.485 \\ -0.588 & 1.000 & 0.993 \\ -0.485 & 0.993 & 1.000 \end{bmatrix}$$

It has eigenvalues [2.40374076, 0.59671277, -0.00045353]. This means that the correlation matrix is destroyed by rounding.

The correct matrix calculated from the data in the Table H.2 with 16 digits looks as:

$$\begin{bmatrix} 1.000 & -0.5882768557\ 970084 & -0.4850646136\ 631822 \\ -0.5882768557\ 970084 & 1.000 & 0.9925075421\ 320323 \\ -0.4850646136\ 631822 & 0.9925075421\ 320323 & 1.000 \end{bmatrix}$$

with eigenvalues 2.4035643712358685, 0.596435606493034,  $2.227109758149771 \times 10^{-8}$ .

Our safe uniform rounding rule allow to present this matrix in a more compact form:

$$\begin{bmatrix} 1. & -0.588\ 276\ 86 & -0.485\ 064\ 61 \\ -0.588\ 276\ 86 & 1. & 0.992\ 507\ 54 \\ -0.485\ 064\ 61 & 0.992\ 507\ 54 & 1. \end{bmatrix}$$

**Definitely the clause 7.2.6 and this example should be reworked**

**7.2.7** In the detailed report that describes how the result of a measurement and its uncertainty were obtained, one should follow the recommendations of **7.1.4** and thus

- a) give the value of each input estimate  $x_i$  and its standard uncertainty  $u(x_i)$  together with a description of how they were obtained;
- b) give the estimated covariances or estimated correlation coefficients (preferably both) associated with all input estimates that are correlated, and the methods used to obtain them;
- c) give the degrees of freedom for the standard uncertainty of each input estimate and how it was obtained;
- d) give the functional relationship  $Y = f(X_1, \dots, X_N)$  and, when they are deemed useful, the partial derivatives or sensitivity coefficients  $\partial f / \partial x_i$ . However, any such coefficients determined experimentally should be given.

NOTE Since the functional relationship  $f$  may be extremely complex or may not exist explicitly but only as a computer program, it may not always be possible to give  $f$  and its derivatives. The function  $f$  may then be described in general terms or the program used may be cited by an appropriate reference. In such cases, it is important that it be clear how the estimate  $y$  of the measurand  $Y$  and its combined standard uncertainty  $u_c(y)$  were obtained.

Результаты выборочных проверок качества представления оцененных данных по фундаментальным физическим константам ФФК-1998, ФФК-2002, ФФК-2006 обсуждались на разных форумах:

**CODATA-20**  
Beijing  
25.10.2006

**Nucleus-2007**  
Voronezh  
25.06.2007

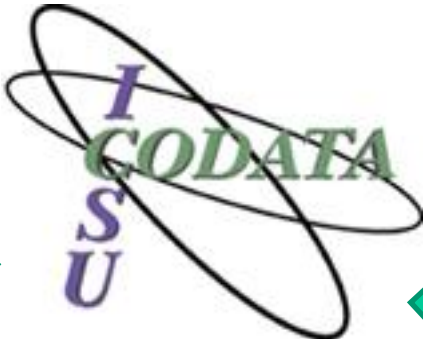
**CODATA-21**  
Kyiv  
08.10.2008

**PDG meeting**  
CERN,  
10.10.2008

**Сессия**  
МКАСД  
Росатом  
Москва  
11.12.2008

**СЯФ ОФН**  
РАН  
Протвино  
24.12.2008

**ИСТОЧНИК ДАННЫХ:**



The NIST Reference on  
Constants, Units, and Uncertainty

**Reviews of Modern Physics**  
80 (2008) 633

P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell, "CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006"

# Reviews of Modern Physics

Over-rounding and improper uncertainty propagation for derived quantities  $\{m_e, e, 1/\alpha(0), h\}$

<b>CODATA: 1986 (1987)</b>	Symbol	Unit	Value(Uncertainty)·Scale	Correlations		
Elementary charge	e	C	1.602 177 33(49) · 10 <sup>-19</sup>	e	<i>h</i>	<i>me</i>
Planck constant	<i>h</i>	J s	6.626 075 5(40) · 10 <sup>-34</sup>	0.997		
Electron mass	<i>me</i>	kg	9.109 389 7(54) · 10 <sup>-31</sup>	0.975	0.989	
1/(Fine struct. const.)	1/α(0)		137.035 989 5(61)	-0.226	-0.154	-0.005
<b>CODATA: 1998 (2000)</b>	<b>Basic constant symbols are in red</b>					
Elementary charge	e	C	1.602 176 462(63) · 10 <sup>-19</sup>	e	<i>h</i>	<i>me</i>
Planck constant	<i>h</i>	J s	6.626 068 76(52) · 10 <sup>-34</sup>	0.999		
Electron mass	<i>me</i>	kg	9.109 381 88(72) · 10 <sup>-31</sup>	0.990	0.996	
1/(Fine struct. const.)	1/α(0)		137.035 999 76(50)	-0.049	-0.002	0.092
<b>CODATA: 2002 (2005)</b>	<b>Basic constant symbols are in red</b>					
Elementary charge	e	C	1.602 176 53(14) · 10 <sup>-19</sup>	e	<i>h</i>	<i>me</i>
Planck constant	<i>h</i>	J s	6.626 0693(11) · 10 <sup>-34</sup>	1.000		
Electron mass	<i>me</i>	kg	9.109 3826(16) · 10 <sup>-31</sup>	0.998	0.999	
1/(Fine struct. const.)	1/α(0)		137.035 999 11(46)	-0.029	-0.010	0.029
<b>CODATA: 2006 (2008)</b>	<b>Basic constant symbols are in red</b>					
Elementary charge	<i>E</i>	C	1.602 176 487(40) · 10 <sup>-19</sup>	e	<i>h</i>	<i>me</i>
Planck constant	<i>H</i>	J s	6.626 068 96(33) · 10 <sup>-34</sup>	0.9999		
Electron mass	<i>Me</i>	Kg	9.109 382 15(45) · 10 <sup>-31</sup>	0.9992	0.9996	
1/(Fine struct.const.)	1/α(0)		137.035 999 679(94)	-0.0142	-0.0005	0.0269

## Correlation matrix eigenvalues of the selected constants in CI units

- 1986: { 2.99891, 1.00084, 0.000420779, **-0.000172106** }
- 1998: { 2.99029, 1.01003, **-0.000441572**, 0.000123580 }
- 2002: { 2.99802, 1.00173, 0.000434393, **-0.000183906** }
- 2006: { 2.99942, 1.00006, 0.000719993, **-0.000202165** }

## Correlation matrix of (e, h, m<sub>e</sub>, 1/α(0) ) uncertainties in “Energy” units

CODATA : 2006(8)	Symbol	[units]	Value (uncertainty) scale	Correlations		
Elementary charge	e	[C]	1.602 176 487(40)10 <sup>-19</sup>	e	<b>h</b>	m <sub>e</sub>
Planck constant	<b>h</b>	[eVs]	4.135 667 33(10)10 <sup>-15</sup>	0.9996		
Electron mass	m <sub>e</sub>	[MeV]	0.510 998 910(13)	0.9966	0.9985	
1/α(0)	<b>α(0)<sup>-1</sup></b>		137.035 989 5 (61)	-0.0142	0.0132	0.0679

Eigenvalues  $\longrightarrow$  { 2.99721, 1.00275, 0.0000341718, **1.40788 10<sup>-6</sup>** }

**Origin: Linear Uncertainties Propagation & Over-rounding**



In May 2005 the accurate data on basic FPC-2002 appeared.  
This gave us possibility for the further investigation of the derived FPC-2002

$\{me, e, 1/\alpha(0), h\}$  :

**Linear DifUPL (default machine precision)**

2002: { 2.99825, 1.00175, 9.95751E-10, 9.23757E-17 }

**Linear DifUPL (SetPrecision[exp,30])**

2002: { 2.99825, 1.00175, 9.95751E-10, -6.95096E-35 }

**Non-Linear DifUPL (second order Taylor polynomial) (SetPrecision[exp,100])**

2002: { 2.99825, 1.00175, 9.95751E-10, 2.86119E-15 }

# Comparison with CODATA recommended

values of derived FPC-2002  $\{m_e, e, 1/\alpha(0), h\}$

1. Insert values of the basic constants from LSA files into formulae

$$m_e = \frac{2 \cdot R_\infty \cdot h}{c \cdot \alpha^2} = 9.109382551053865 \cdot 10^{-31}$$

$$e = \sqrt{\frac{2 \cdot \alpha \cdot h}{\mu_0 \cdot c}} = 1.6021765328551825 \cdot 10^{-19}$$

2. Biases were calculated supposing the multi-normal distribution for basic FPC. They are much less than corresponding standard deviations

	$m_e$	$e$	$1/\alpha(0)$
bias	$2.4943 \cdot 10^{-66}$	$-2.6186 \cdot 10^{-58}$	$1.7918 \cdot 10^{-36}$
sigma	$1.5575 \cdot 10^{-27}$	$1.7918 \cdot 10^{-36}$	$5.0 \cdot 10^{-7}$

**Comparison with CODATA recommended values for covariance matrix of derived FPC  $\{m_e, e, 1/\alpha(0), h\}$**

**Properties of the correlation matrix for vector  $\{m_e, e, 1/\alpha(0), h\}$  calculated with DifUPL(2,4,1)**

<b>DifUPL(2,4,1)</b>	<b>17.06.2006</b>
Symmetry	True
Positive definiteness	False
Is rounding correct?	False
Minimal eigenvalue	<b>-6.9 · 10<sup>-108</sup></b>
Rounding threshold	<b>Warning!</b> Matrix is non positive definite

**Properties of the correlation matrix for vector  $\{m_e, e, 1/\alpha(0), h\}$  calculated with DifUPL(2,4,2)**

<b>DifUPL(2,4,2)</b>	<b>17.06.2006</b>
Symmetry	True
Positive definiteness	True
Is rounding correct?	True
Minimal eigenvalue	<b>2.8 · 10<sup>-15</sup></b>
Rounding threshold	15

# But where is the end of the rounded vector for derived FPC-2002 ?

FPC	Our calculations with DifUPL(2,4,2)	Allascii (NIST-2002)	IMPROBABLE !!!
$m_e$	$9.109382551053865 \cdot 10^{-31}$	$9.1093826 \cdot 10^{-31}$	
$e$	$1.6021765328551828 \cdot 10^{-19}$	$1.60217653 \cdot 10^{-19}$	
$1/\alpha(0)$	137.035999105576373	137.03599911	
$h$	$6.626069310828000 \cdot 10^{-34}$ (LSA)	$6.6260693 \cdot 10^{-34}$	

$$\chi^2 = 2.18 \cdot 10^{+10}$$

Thus, we see that the values of the derived vector components  $\{m_e, e, 1/\alpha(0)\}$  presented on the NIST site in allascii.txt file are

**improbable!!!**

The vector is out of the scatter region for the  $10^{10}$  standard deviations  
due to improper uncertainty propagation and over-rounding

# Выводы по результатам выборочной поверки ФФК-2006

1. На сайте NIST'a не представлены исходные данные, использованные для получения оценок ФФК-2006. Исходные данные представлены в публикации *Rev. Mod. Phys.* **80** (2008) 633.
2. В публикации точность представления коэффициентов корреляции погрешностей исходных данных, используемых для оценки постоянной Ридберга, увеличена до 4 десятичных знаков, однако матрица корреляций (как она представлена в TABLE XXIX на стр. 692) не является положительно полуопределенной матрицей (имеет два отрицательных собственных числа).
3. Подматрица корреляций оцененных ФФК-2006, представленная в TABLE L на стр. 715 также не является положительно полуопределенной матрицей. Для нескольких выборок значений констант и их матриц корреляций, например :
  1. (пост. Планка, элементарный заряд, масса электрона, 1/пост. тонкой структуры);
  2. (масса протона в МэВ, масса нейтрона в МэВ, атомная пост. массы в МэВ);из данных, представленных на сайте, их матрицы корреляций также имеют отрицательные собственные числа.
4. Таким образом, данные по ФФК-2006, рекомендованные CODATA для международного использования, **не пригодны** для вычислений величин выражаемых через три или более оцененных постоянных.
5. На сайте NIST (с марта 2007 года) имеется обещание разместить всю информацию как об исходных данных (использованных для оценки базовых постоянных) так и результаты оценки базовых постоянных с достаточной точностью. Пока такой информации нет, использовать рекомендованные CODATA данные по ФФК-2006 в высокоточных вычислениях с высоким требованием к надежности (достоверности) результатов **нельзя**.

# CONCLUSION on the GUM-2008

- ✧ The GUM-2008 should be corrected in places where the rounding rules for correlated data are discussed and used (**Clause 7.2.6, Example H.2**) ;
- ✧ The GUM formula for the nonlinear uncertainty propagation should be corrected to assure the positivity of combined variance (**Clause 5.1.2,note**);
- ✧ In case of differential nonlinear uncertainty propagation the higher order sensitivities and higher order moments of the input probability distribution should be calculated and explicitly given with proper precision. This recommendation and our rule to find the order  $T$  of the Taylor polynomials to assure the positive definiteness of the correlation matrix for  $D$ -dimensional vector function depending upon  $I$ -random variables should be added to the extended **clauses 7.2.5 or 7.2.7**.
- ✧ Statement on the obligatory quotation of the rounding thresholds for the positive definite correlation matrix, for the mean values, and their uncertainties should be included into the **clause 7.2.5**;
- ✧ **CAUTION:** the rounding thresholds for the uniform rounding of correlated data impose severe requirements on the storage and exchange formats of the correlated data. This caution in proper wording should be added to the corrected **clause 7.2.6**

# CONCLUSION on the FPC-2006

Selective tests of the consecutive releases of the FPC-1986, FPC-1998, FPC-2002, and FPC-2006 shows that the technology to adjust FPC used in FCDC is questionable. The independent adjustments, but based on the same input data sample, are urgently needed.

It will be much helpful if Russian FPC Working Group could organize and conduct regularly the independent adjustments of the FPC and compare results with that of produced in FCDC(NIST).

## FCDC(NIST)

**Peter J. Mohr**

Jonathan Baker

Rodrigo Ibacache

Svetlana A. Kotochigova

Barry N. Taylor

David Newell

Paul Indelicato

Ulrich D. Jentschura

## CODATA FPC WG

Franco Cabiati

Jeff Flowers

Kenichi Fujii

Savely G. Karshenboim

Ingvar Lindgren

Werner Martienssen

Peter J. Mohr

David B. Newell

Francois Nez

Terry J. Quinn

Barry N. Taylor

Barry M. Wood

Zhang Zhonghua

Claudine Thomas

## Russian FPC WG

**Каршенбойм С. Г.**

Багаев С. Н.

Варшалович Д. А.

Иванов В. Г.

Иванчик А. В.

Карагиоз О. В.

Кононогов С. А.

Коробов В. И.

Мельников В. Н.

Неронов Ю. И.

Пальчиков В. Г.

Фаустов Р. Н.

Шабает В. М.

Шелюто В. А.

Шифрин В. Я.

Чуновкина А. Г.

Эйдельман С. И.

# Report on the Meeting of the CODATA Task Group on Fundamental Constants

14 June 2008, Broomfield, Colorado, USA

Prepared by David Newell

National Institute of Standards and Technology



## 11. Other topics

- a. A Freedom Of Information Act (FOIA) was issued to NIST wanting all of our code and data for the 2006 LSA, and we complied.
- b. Atomic Mass Data Center - *Wapstra* has died and *Audi* has closed the AMDC. It was recommended that CODATA Task Group issue the following statement:

“The CODATA Task Group on Fundamental Constants urges IUPAP to officially recommend to relevant agencies that support for an atomic mass evaluation program similar to the past activities of the AMDC, is vital for the determination of the fundamental constants and highly important to physics in general.”





# Numerical Peer Review is urgently needed !

Historically it turns out that traditional chain to assure the quality of the published scientific data:

**Authors → Journal peer reviewers → Editorial boards**

and evolved publishing standards are insufficient to express and transfer multidimensional correlated data with metrological quality needed for applications

**CAUTION** : even the more powerful chain:

**Authors → Journal peer reviewers → Journal editors →  
→ RPP article finders → RPP encoders → RPP overseers →  
→ Verifiers(Authors) → RPP peer reviewers → RPP editors →  
→ Journal peer reviewers → Journal editors**

used by **PDG** collaboration is insufficient to represent **RPP** data with metrological quality needed for different applications.

# Summary & a Plea to PDG Collaboration


We have problems with numerical expression and presentation of correlated multidimensional data in publications and in computer readable files.

These problems are common in the whole scientific community and originated in the absence of the widely accepted standard to express numerically the multidimensional correlated data and the absence of the numerical peer review in traditional and electronic publishing.

**NUMERICAL PEER REVIEW** is impossible without uniformity in multidimensional data expression and exchange in computer readable and “computer understandable” forms.

**STANDARDS** for multidimensional measured data expression and publication in electronic media is urgently needed

As metrologists move too slow, we propose PDG to workout the mockup of the standard and implement it in PDG traditional and electronic publications. The physics community will follow PDG. Physics authors will produce data of high metrological quality.



**PDG will not stay alone! The movement to standardize the quality of e-data has started already.**



# American Nuclear Society

## Why Should Companies Support Standards Development?

Written by Suriya Ahmad for *Nuclear Standards News*  
(Vol. 33, No. 6; **Nov-Dec, 2002**).

As professionals working in the nuclear energy industry, we are committed to the benefits that nuclear technology provides humankind.

The future of nuclear energy depends on maintaining a strong safety record, economics, and effective waste management.

So, how does the industry gather and maintain the information needed to meet these goals? It is done, in a large part, through the use of **voluntary consensus standards**.

**Voluntary consensus standards represent the best knowledge of the field. They are written by groups of volunteers who are regarded as the technical experts in the nuclear energy industry.**

[1] **SHARING PUBLICATION-RELATED DATA AND MATERIALS:  
RESPONSIBILITIES OF AUTHORSHIP IN THE LIFE SCIENCES**

Washington, D.C. (2003) [www.nap.edu](http://www.nap.edu)

DATA **SCIENCE** Journal



CODATA

[2] Jens Klump et al., **DATA PUBLICATION IN THE OPEN ACCESS INITIATIVE**  
CODATA DSJ 5 (2006) 79-83

[3] David R. Lide, **Data quality - more important than ever in the Internet age**  
CODATA DSJ 6 (2007) 154-155

[4] Ray P. Norris, **How to Make the Dream Come True: The Astronomers' Data  
Manifesto**  
CODATA DSJ 6 (2007) S116-S124

[5] Vladimir V. Ezhela, **Multimeasurand ISO GUM Supplement is Urgent**  
CODATA DSJ 6 (2007) S676-S689, Errata, DSJ 7 (2008) E2-E2

[6] Shuichi Iwata, **SCIENTIFIC "AGENDA" OF DATA SCIENCE**  
CODATA DSJ 7 (2008) 54-56