SPÉCIFICATION TECHNIQUE

ISO/TS 28037

Première édition
2010-09-01

Détermination et utilisation des fonctions d'étalonnage linéaire

Determination and use of straight-line calibration functions

Numéro de référence
ISO/TS 28037:2010(F)

ISO copyright office
Case postale 56 • CH-1211 Geneva 20
Tel. + 41 22 749 01 11
Fax + 41 22 749 09 47
E-mail copyright@iso.org
Web www.iso.org

Version française parue en 2013

Publié en Suisse

Sommaire

Page

Avant-propos

L'ISO (Organisation internationale de normalisation) est une fédération mondiale d'organismes nationaux de normalisation (comités membres de l'ISO). L'élaboration des Normes internationales est en général confiée aux comités techniques de l'ISO. Chaque comité membre intéressé par une étude a le droit de faire partie du comité technique créé à cet effet. Les organisations internationales, gouvernementales et non gouvernementales, en liaison avec l'ISO participent également aux travaux. L'ISO collabore étroitement avec la Commission électrotechnique internationale (CEI) en ce qui concerne la normalisation électrotechnique.

Les Normes internationales sont rédigées conformément aux règles données dans les Directives ISO/CEI, Partie 2.

La tâche principale des comités techniques est d'élaborer les Normes internationales. Les projets de Normes internationales adoptés par les comités techniques sont soumis aux comités membres pour vote. Leur publication comme Normes internationales requiert l'approbation de 75 % au moins des comités membres votants.

Dans d'autres circonstances, en particulier lorsqu'il existe une demande urgente du marché, un comité technique peut décider de publier d'autres types de documents normatifs:

— une Spécification publiquement disponible ISO (ISO/PAS) représente un accord entre les experts dans un groupe de travail ISO et est acceptée pour publication si elle est approuvée par plus de 50 % des membres votants du comité dont relève le groupe de travail;

— une Spécification technique ISO (ISO/TS) représente un accord entre les membres d'un comité technique et est acceptée pour publication si elle est approuvée par 2/3 des membres votants du comité.

Une ISO/PAS ou ISO/TS fait l'objet d'un examen après trois ans afin de décider si elle est confirmée pour trois nouvelles années, révisée pour devenir une Norme internationale, ou annulée. Lorsqu'une ISO/PAS ou ISO/TS a été confirmée, elle fait l'objet d'un nouvel examen après trois ans qui décidera soit de sa transformation en Norme internationale soit de son annulation.

L'attention est appelée sur le fait que certains des éléments du présent document peuvent faire l'objet de droits de propriété intellectuelle ou de droits analogues. L'ISO ne saurait être tenue pour responsable de ne pas avoir identifié de tels droits de propriété et averti de leur existence.

L'ISO/TS 28037:2010 a été élaborée par le comité technique ISO/TC 69, *Applications des méthodes statistiques*, sous-comité SC 6, *Méthodes et résultats de mesure*.

Introduction

L'étalonnage est un élément essentiel de la plupart des méthodes de mesure qui consiste souvent à ajuster des données mesurées au moyen d'une fonction d'étalonnage décrivant au mieux la relation d'une variable à une autre. La présente Spécification Technique considère les fonctions d'étalonnage linéaire qui décrivent une variable dépendante Y comme une fonction d'une variable indépendante X. La relation linéaire dépend de l'ordonnée à l'origine A et de la pente B de la droite. A et B sont désignés sous le nom de paramètres de la droite. Une procédure d'étalonnage a pour objet de déterminer des estimations a et b de A et B pour un système de mesure particulier soumis à étude, sur la base des données de mesure (x_i,y_i), $i = 1,\ldots, m$, fournies par le système de mesure. Une incertitude est associée aux données de mesure, ce qui signifie qu'une incertitude sera associée à a et b. La présente Spécification Technique décrit la manière dont a et b peuvent être déterminés sur la base des données et des informations relatives à l'incertitude associée. Elle fournit aussi un moyen d'évaluation des incertitudes associées à ces estimations. Le traitement de l'incertitude dans la présente Spécification Technique est effectué conformément au Guide ISO/CEI 98-3:2008, « Guide pour l'expression de l'incertitude de mesure » (GUM).

Les informations sur l'incertitude associée aux données de mesure permettent de spécifier une méthode appropriée pour déterminer les estimations des paramètres de la fonction d'étalonnage. Ces informations sur l'incertitude peuvent inclure les effets de covariance quantifiés, concernant les dépendances entre toutes ou certaines des grandeurs considérées.

Une fois le modèle linéaire ajusté aux données, il est nécessaire de déterminer si ce modèle et les données sont cohérents entre eux ou non. En cas de cohérence, le modèle ainsi obtenu peut valablement être utilisé pour prévoir une valeur x de la variable X correspondant à une valeur mesurée y de la variable Y fournie par le même système de mesure. Il peut aussi être utilisé pour évaluer les incertitudes associées aux paramètres de la fonction d'étalonnage et l'incertitude associée à la valeur prédite x.

Il est par conséquent possible de considérer que la détermination et l'utilisation d'une fonction d'étalonnage linéaire se composent de cinq étapes:

1) Obtenir les informations relatives à l'incertitude et à la covariance associées aux données de mesure – bien que dépendant d'un domaine spécifique de mesure, des exemples sont donnés dans la présente Spécification Technique;

2) Fournir les meilleures estimations des paramètres de la droite;

3) Valider le modèle, aussi bien sur le plan fonctionnel (les données reflètent-elles bien une relation linéaire ?) que statistique (l'étendue des données est-elle cohérente avec leurs incertitudes associées ?) en utilisant un test de chi deux;

4) Obtenir les incertitudes-types et la covariance associées à l'estimation des paramètres de la droite;

5) Utiliser la fonction d'étalonnage pour la prédiction, c'est-à-dire déterminer une estimation x de la variable X et son incertitude associée qui corresponde à une valeur mesurée y de la variable Y et à son incertitude associée.

Les étapes ci-dessus sont illustrées schématiquement sur la Figure 1.

L'objectif principal de la présente Spécification Technique est de traiter les étapes 2 à 5. Par conséquent, en ce qui concerne l'étape 1, l'utilisateur, avant d'utiliser la présente Spécification Technique, devra fournir les incertitudes-types et les covariances le cas échéant, associées aux valeurs mesurées Y et, selon le cas, celles associées aux valeurs mesurées X. Il convient de tenir compte des principes du GUM pour l'évaluation de ces incertitudes sur la base d'un modèle de mesure spécifique au domaine d'étude.

L'ISO 11095:1996[14] traite de l'étalonnage linéaire utilisant des matériaux de référence. Il se différencie de la présente Spécification technique par les points mentionnés dans le Tableau 1.

Les méthodes numériques fournies sont basées sur la référence.[6]

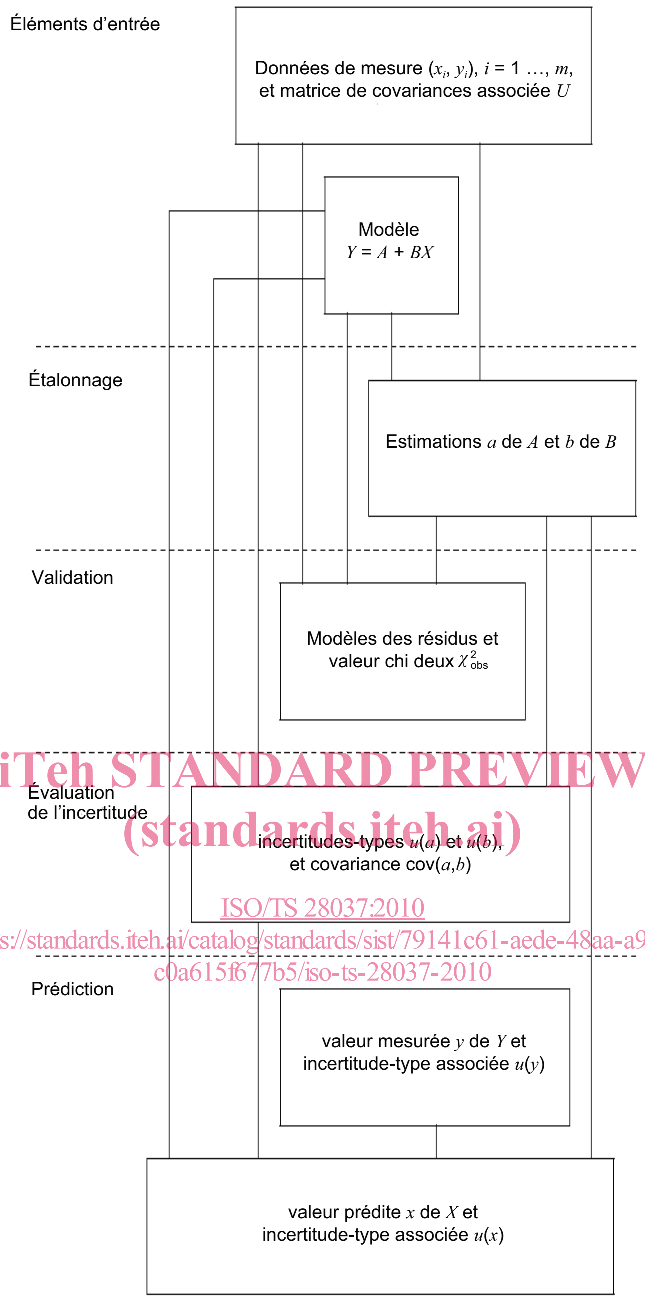

Figure 1 — Résumé des étapes pour la détermination et l'utilisation des fonctions d'étalonnage linéaire

Tableau 1 — Différences entre l'ISO 11095:1996 et l'ISO/TS 28037:2010

Caractéristiques	ISO 11095:1996	ISO/TS 28037:2010
Traite spécialement des matériaux de référence	Oui	Plus général
Valeurs *X* supposées connues avec exactitude	Oui	Informations d'incertitude plus générales
Toutes les valeurs mesurées obtenues séparément	Oui	Informations d'incertitude plus générales
Terminologie en accord avec celle du GUM	Non	Oui
Types de structure d'incertitude traités	Deux	Cinq, y compris le cas le plus général
Incertitude seulement associée à des erreurs aléatoires	Oui	Informations d'incertitude plus générales
Essai de cohérence	ANOVA	Chi deux
Incertitude associée à des prédictions	Ad hoc	Compatible avec le GUM

Détermination et utilisation des fonctions d'étalonnage linéaire

1 Domaine d'application

La présente Spécification Technique traite des fonctions d'étalonnage linéaire, c'est-à-dire une droite, qui décrivent la relation entre deux variables X et Y, notamment les fonctions de la forme $Y = A + BX$. Bien que de nombreux principes s'appliquent à des types de fonction d'étalonnage plus généraux, les approches décrites utilisent dans la mesure du possible cette forme simple de la fonction d'étalonnage linéaire.

Les valeurs des paramètres A et B sont déterminées sur la base de paires de données mesurées (x_i,y_i), $i = 1,\ldots, m$. Selon la nature des incertitudes associées à ces données, différents cas sont considérés. Aucune hypothèse n'est faite sur les erreurs relatives à y_i pour savoir si elles sont homoscédastiques (de variances égales), et de même pour x_i lorsque les erreurs ne sont pas négligeables.

Les estimations des paramètres A et B sont déterminées par les méthodes des moindres carrés. La présente Spécification Technique met l'accent sur le choix de la méthode des moindres carrés la plus appropriée au type de données de mesure, notamment les méthodes qui reflètent les incertitudes associées. Le cas le plus général de matrice de covariances associée aux données de mesure est traité, mais des cas particuliers importants, donnant lieu à des calculs plus simples, sont décrits en détail.

Pour tous les cas considérés, les méthodes de validation du choix de fonctions d'étalonnage linéaire et d'évaluation des incertitudes et de la covariance associées aux estimations des paramètres sont données.

La présente Spécification Technique décrit aussi l'utilisation des estimations des paramètres de fonction d'étalonnage et de leurs incertitudes et covariance associées dans la prédiction d'une valeur de X et son incertitude-type associée pour une valeur mesurée de Y donnée avec son incertitude-type associée.

NOTE 1 La Spécification Technique ne spécifie pas un traitement général des valeurs aberrantes parmi les données de mesure, bien que les essais de validation puissent être utilisés comme base d'identification des données divergentes.

NOTE 2 La Spécification Technique décrit une méthode d'évaluation des incertitudes associées aux données de mesure lorsque ces incertitudes ne sont connues qu'avec un facteur d'échelle (Annexe E).

2 Références normatives

Les documents de référence suivants sont indispensables pour l'application du présent document. Pour les références datées, seule l'édition citée s'applique. Pour les références non datées, la dernière édition du document de référence s'applique (y compris les éventuels amendements).

Guide ISO/CEI 99:2007, *Vocabulaire international de métrologie — Concepts fondamentaux et généraux et termes associés (VIM)*

Guide ISO/CEI 98-3:2008, *Incertitude de mesure — Partie 3: Guide pour l'expression de l'incertitude de mesure (GUM:1995)*

3 Termes et définitions

Pour les besoins du présent document, les termes et définitions donnés dans le Guide ISO/CEI 98-3:2008 et le Guide ISO/CEI 99:2007 ainsi que les suivants s'appliquent.

Un glossaire des principaux symboles est donné dans l'Annexe G.

3.1
valeur mesurée
valeur d'une grandeur représentant un résultat de mesure

[SOURCE: Guide ISO/CEI 99:2007, 2.10]

3.2
incertitude de mesure
paramètre non négatif qui caractérise la dispersion des valeurs attribuées à un mesurande, à partir des informations utilisées

[SOURCE: Guide ISO/CEI 99:2007, 2.26]

3.3
incertitude-type
incertitude de mesure exprimée sous la forme d'un écart-type

[SOURCE: Guide ISO/CEI 99:2007, 2.30]

3.4
covariance associée à deux valeurs
paramètre qui caractérise l'interdépendance des valeurs attribuées à deux mesurandes, à partir des informations utilisées

3.5
matrice de covariances de mesure
matrice de covariances
matrice de dimension $N \times N$, associée à une estimation vectorielle d'un vecteur de grandeurs de dimension $N \times 1$, qui comporte sur sa diagonale, les carrés des incertitudes-types associées aux composantes respectives de l'estimation vectorielle du vecteur des grandeurs, et dans ses positions hors diagonale, les covariances associées à des paires de composantes de l'estimation vectorielle du vecteur des grandeurs

Note 1 à l'article: Une matrice de covariances $\boldsymbol{U_x}$ de dimension $N \times N$ associée à l'estimation vectorielle x d'un vecteur de grandeurs $\boldsymbol{X}$ se présente sous la forme

$$\boldsymbol{U}_{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \operatorname{cov}(x_1, x_1) & \dots & \operatorname{cov}(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \operatorname{cov}(x_N, x_1) & \dots & \operatorname{cov}(x_N, x_N) \end{bmatrix}$$

où $\operatorname{cov}(x_i, x_i) = u^2(x_i)$ est la variance (incertitude-type au carré) associée à x_i et $\operatorname{cov}(x_i, x_j)$ est la covariance associée à x_i et x_j. $\operatorname{cov}(x_i, x_j) = 0$ si les éléments X_i et X_j de $\boldsymbol{X}$ n'ont pas de corrélation.

Note 2 à l'article: Les covariances sont aussi appelées incertitudes mutuelles.

Note 3 à l'article: Une matrice de covariances est aussi appelée matrice de variances-covariances.

Note 4 à l'article: Définition adaptée du Guide ISO/CEI 98-3:2008, définition 3.11/Suppl.1:2008.[13]

3.6
modèle de mesure
relation mathématique entre toutes les grandeurs qui interviennent dans un mesurage

[SOURCE: Guide ISO/CEI 99:2007, 2.48]

3.7
modèle fonctionnel
modèle statistique prenant en compte des erreurs associées à la variable dépendante

3.8
modèle structurel
modèle statistique prenant en compte des erreurs associées aux variables indépendantes et dépendantes

3.9
étalonnage

opération qui, dans des conditions spécifiées, établit en une première étape une relation entre les valeurs et les incertitudes de mesure associées qui sont fournies par des étalons et les indications correspondantes avec les incertitudes associées, puis utilise en une seconde étape cette information pour établir une relation permettant d'obtenir un résultat de mesure à partir d'une indication

Note 1 à l'article: Un étalonnage peut être exprimé sous la forme d'un énoncé, d'une fonction d'étalonnage, d'un diagramme d'étalonnage, d'une courbe d'étalonnage ou d'une table d'étalonnage. Dans certains cas, il peut consister en une correction additive ou multiplicative de l'indication avec une incertitude de mesure associée.

Note 2 à l'article: Il convient de ne pas confondre l'étalonnage avec l'ajustage d'un système de mesure, souvent appelé improprement «auto-étalonnage», ni avec la vérification de l'étalonnage.

Note 3 à l'article: La seule première étape dans la définition est souvent perçue comme étant l'étalonnage.

[SOURCE: Guide ISO/CEI 99:2007, 2.39]

3.10
loi de probabilité

⟨variable aléatoire⟩ fonction donnant la probabilité qu'une variable aléatoire prenne toute valeur donnée ou appartienne à un ensemble donné de valeurs

Note 1 à l'article: La probabilité pour un ensemble de valeurs de la variable aléatoire est égale à 1.

Note 2 à l'article: Une loi de probabilité est dite à une variable lorsqu'elle est relative à une seule variable aléatoire (scalaire), et à plusieurs variables lorsqu'elle est relative à un vecteur de variables aléatoires. Une loi de probabilité à plusieurs variables est aussi décrite comme distribution combinée.

Note 3 à l'article: Une loi de probabilité peut prendre la forme d'une fonction de répartition ou d'une fonction de densité de probabilité.

Note 4 à l'article: Définition et note 1 adaptées de l'ISO 3534-1:1993, définition 1.3 et du Guide ISO/CEI 98-3:2008, définition C.2.3; notes 2 et 3 adaptées du Guide ISO/CEI 98-3:2008, définition 3.1/Suppl.1:2008.[13]

3.11
loi normale

loi de probabilité d'une variable aléatoire continue X avec pour fonction de densité de probabilité

$$g\times(\xi)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\xi-\mu}{\sigma}\right)^2\right]$$

pour $-\infty < \xi < +\infty$

Note 1 à l'article: μ est l'espérance mathématique et σ est l'écart-type de X.

Note 2 à l'article: La loi normale est aussi appelée loi de Gauss.

Note 3 à l'article: Définition et NOTE 1 adaptées de l'ISO 3534-1:1993, définition 1.37; NOTE 2 adaptée du Guide ISO/CEI 98-3:2008, définition C.2.14.

3.12
distribution *t*

loi de probabilité d'une variable aléatoire continue X avec pour fonction de densité de probabilité

$$g\times(\xi)=\frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\sqrt{\pi\nu}\,\Gamma(\nu/2)}\left(1+\frac{\xi^2}{\nu}\right)^{-(\nu+1/)2}$$

pour $-\infty < \xi < +\infty$, avec le paramètre ν, un entier positif, les degrés de liberté de la loi, où

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} \mathrm{d}t, \quad z > 0,$$

est la fonction gamma

[SOURCE: Guide ISO/CEI 98-3:2008, 3.5/Suppl.1:2008]

3.13
loi de chi deux
distribution χ^2
loi de probabilité d'une variable aléatoire continue X avec pour fonction de densité de probabilité

$$g\times(\xi) = \frac{\xi^{(\nu/2)-1}}{2^{\nu/2}\Gamma(\nu/2)} \exp(-\frac{\xi}{2})$$

pour $0 \leq \xi < \infty$, avec le paramètre ν, un entier positif, où Γ est la fonction gamma

Note 1 à l'article: La somme des carrés des variables normales centrées réduites indépendantes ν est une variable aléatoire χ^2 ayant pour paramètre ν; ν est alors appelé degrés de liberté.

3.14
matrice définie positive
matrice $\boldsymbol{M}$ de dimension $n \times n$ ayant la propriété $\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \ \boldsymbol{M} \boldsymbol{z} > 0$ pour tous les vecteurs $\boldsymbol{z}$ non nuls de dimension $n \times 1$

3.15
matrice semi-définie positive
matrice $\boldsymbol{M}$ de dimension $n \times n$ ayant la propriété $\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}} \ \boldsymbol{M} \boldsymbol{z} \geq 0$ pour tous les vecteurs $\boldsymbol{z}$ non nuls de dimension $n \times 1$

4 Conventions et notation

Pour les besoins de la présente Spécification technique, les conventions et notations suivantes sont adoptées.

4.1 X est appelé variable indépendante et Y, variable dépendante même lorsque le contenu de X et Y est « interchangeable », comme décrit dans l'Article 7, par exemple.

4.2 Les grandeurs A et B sont appelées les paramètres de la fonction d'étalonnage linéaire $Y = A + BX$. A et B sont aussi utilisées pour désigner des variables (virtuelles) dans les expressions impliquant les paramètres de la fonction d'étalonnage.

4.3 Les grandeurs X_i et Y_i sont utilisées comme variables (virtuelles) pour désigner les coordonnées du $i^{\text{ème}}$ point de données.

4.4 Les constantes A^* et B^* sont des valeurs (inconnues) de A et B qui caractérisent la fonction d'étalonnage linéaire $Y = A^* + B^*X$ pour un système de mesure spécifique considéré.

4.5 Les constantes X_i^* et Y_i^* sont les coordonnées (inconnues) du $i$ème point de données fournies par le système de mesure satisfaisant à $Y_i^* = A^* + B^* X_i^*$.

4.6 x_i et y_i sont les valeurs mesurées des coordonnées du $i$ème point de données.

4.7 a et b sont les estimations des paramètres de la fonction d'étalonnage relatives au système de mesure.

4.8 x_i^* et y_i^* sont les estimations des coordonnées du $i$ème point de données satisfaisant à $y_i^* = a + bx_i^*$.

4.9 Un vecteur de dimension $m \times 1$ est ainsi noté:

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^T = \begin{bmatrix} x_1 & \dots & x_m \end{bmatrix},$$

et une matrice de dimension $m \times n$ est ainsi notée:

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{A}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Les dimensions du vecteur ou de la matrice sont toujours spécifiées pour éviter toute possibilité de confusion.

4.10 T désigne une transposée.

4.11 La matrice nulle est désignée par **0** et le vecteur unitaire est désigné par **1**.

4.12 Certains symboles ont plusieurs significations. Le contexte en clarifie l'usage.

4.13 Les nombres affichés dans les tableaux avec un nombre fixe de décimales sont des représentations correctement arrondies de nombres enregistrés avec une plus grande précision, comme c'est le cas dans un tableur, par exemple. Par conséquent, des incohérences mineures peuvent apparaître entre les affichages des sommes pour une colonne et l'affichage nombres sommés présents dans cette colonne.

4.14 Dans certains tableaux, un numéro de paragraphe au-dessus d'une ou de plusieurs colonnes indique où se situe la formule de détermination des valeurs en dessous.

4.15 Dans les exemples, alors que les valeurs de données sont fournies avec une précision donnée, les résultats des calculs sont fournis avec une plus grande précision afin de permettre à l'utilisateur de comparer les résultats lorsqu'il effectue les calculs.

5 Principes de l'étalonnage linéaire

5.1 Généralités

5.1.1 Le présent article traite de la manière dont une relation $Y = A + BX$ qui explique la variable dépendante Y (également appelée « réponse ») en fonction de la variable indépendante X (également appelée « stimulus ») peut être déterminée à partir de données de mesure. Lors de l'étalonnage, des données de mesure sont obtenues lorsqu'un instrument de mesure caractérisé par une fonction d'étalonnage ayant des valeurs (inconnues) A^* et B^* est « stimulé » par des objets de valeurs étalonnées X_i, exprimées en unités normalisées et les «réponses» correspondantes ou indications Y_i de l'instrument sont enregistrées. La relation fournit la réponse Y du système pour un objet de la grandeur étalon X. Ce processus est appelé « prédiction directe ». D'une façon plus pratique, cette relation permet aussi de convertir une réponse mesurée y de Y en une estimation x, en unités normalisées de la propriété X d'un objet. Ce processus est appelé « prédiction inverse » ou « prédiction ».

5.1.2 Il conviendra que l'étalonnage d'un système de mesure tienne compte des incertitudes de mesure, et, s'il en existe, des covariances entre les données de mesure. L'élément de sortie d'une procédure d'étalonnage est une fonction d'étalonnage à utiliser pour la prédiction (et si nécessaire, pour une évaluation de prédiction). Cet élément de sortie comprend également les incertitudes-types et la covariance associées aux estimations de a et b des paramètres décrivant la fonction d'étalonnage, qui sont utilisées pour évaluer les incertitudes-types associées à la prédiction inverse (et à la prédiction directe).

5.2 Éléments d'entrée pour la détermination de la fonction d'étalonnage

5.2.1 Données de mesure

Les informations nécessaires à la détermination de la fonction d'étalonnage linéaire sont les données de mesure, leurs incertitudes-types et les covariances associées. Dans la présente Spécification technique, les données de mesure sont désignées par (x_i, y_i), $i = 1,\ldots, m$, c'est-à-dire, les m paires de valeurs mesurées de X et Y. On considère que m est au moins égal à deux et que les valeurs de x_i ne sont pas toutes égales entre elles.

NOTE Les incertitudes associées aux estimations de a et b diminuent généralement en fonction de l'augmentation de m. Par conséquent, il convient que l'étalonnage ait pour objet d'utiliser autant de points de données mesurés qu'il est possible d'exploiter.

5.2.2 Incertitudes et covariances associées

Les incertitudes-types associées à x_i et y_i sont désignées respectivement par $u(x_i)$ et $u(y_i)$. La covariance entre x_i et x_j est désignée par $\mathrm{cov}(x_i, x_j)$. De même, celles entre y_i et y_j, et entre x_i et y_j, sont désignées respectivement par $\mathrm{cov}(y_i, y_j)$ et $\mathrm{cov}(x_i, y_j)$. L'Annexe D indique la manière dont les incertitudes et les covariances associées à la réponse mesurée et aux variables de stimulus peuvent être évaluées et donne une interprétation de ces informations d'incertitude. L'ensemble des informations d'incertitude sont organisées sous la forme des éléments d'une matrice $\boldsymbol{U}$ de dimension $2m \times 2m$ comportant les variances (incertitudes-types au carré) $u^2(x_i)$ et $u^2(y_i)$ et les covariances:

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} u^2(x_1) & \cdots & \mathrm{cov}(x_1,x_m) & \mathrm{cov}(x_1,y_1) & \cdots & \mathrm{cov}(x_1,y_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{cov}(x_m,x_1) & \cdots & u^2(x_m) & \mathrm{cov}(x_m,y_1) & \cdots & \mathrm{cov}(x_m,y_m) \\ \mathrm{cov}(y_1,y_1) & \cdots & \mathrm{cov}(y_1,x_m) & u^2(y_1) & \cdots & \mathrm{cov}(y_1,y_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{cov}(y_m,x_1) & \cdots & \mathrm{cov}(y_m,x_m) & \mathrm{cov}(y_m,y_1) & \cdots & u^2(y_m) \end{bmatrix}$$

Pour de nombreuses applications, certaines ou toutes les covariances sont prises égales à zéro (voir 5.3).

NOTE La présente Spécification technique traite des problèmes où $u(x_i)$ ou $u(y_i)$ sont généralement différentes.

5.3 Détermination de la fonction d'étalonnage

5.3.1 Les éléments d'entrée qui permettent de déterminer la fonction d'étalonnage sont les données de mesure, leurs incertitudes et éventuellement leurs covariances associées. Compte tenu des paramètres A et B, les éléments d'entrée peuvent être utilisés pour fournir une mesure de l'écart du $i^{\text{ème}}$ point de données (x_i, y_i) à la droite $Y = A + BX$. Les estimations de a et b sont déterminées en minimisant la somme des carrés de ces écarts, ou par une mesure plus générale si une covariance n'est pas nulle. La réalisation de ce qui précède dépend de la «structure d'incertitude» associée aux données de mesure. Cette structure d'incertitude est liée aux réponses aux questions suivantes:

i) Les incertitudes associées aux valeurs mesurées x_i sont-elles négligeables ?

ii) Les covariances associées aux paires de valeurs mesurées sont-elles négligeables ?

5.3.2 Les cas suivants, classés dans un ordre de complexité croissante et selon les réponses aux questions de 5.3.1, sont pris en compte dans la présente Spécification technique:

a) Seules les incertitudes sont associées aux valeurs mesurées y_i et toutes les covariances associées aux données sont considérées comme négligeables (Article 6);

b) Les incertitudes associées aux valeurs mesurées x_i et y_i et toutes les covariances associées aux données sont considérées comme négligeables (Article 7);

c) Les incertitudes associées aux valeurs mesurées x_i et y_i et seules les covariances sont associées aux paires (x_i, y_i) (Article 8);

d) Seules les incertitudes sont associées aux valeurs mesurées y_i et seules les covariances sont associées à y_i et y_j $(i \neq j)$ (Article 9);

e) Le cas le plus général où il existe des incertitudes associées aux valeurs mesurées x_i et y_i et des covariances associées à toutes les paires de valeurs de x_i, x_j, y_k et y_l (Article 10).

5.3.3 Pour chacun des cas de 5.3.2, on a à disposition:

a) les données de mesure prescrites et la structure d'incertitude;

b) le modèle statistique correspondant;

c) le type de moindres carrés traité;

d) les étapes de calcul;

e) les propriétés du modèle statistique;

f) la validation du modèle;

g) l'organisation des calculs pour l'ordinateur, le cas échéant;

h) un algorithme numérique, le cas échant; et

i) un ou plusieurs exemples.

5.4 Traitement numérique

L'Annexe C donne une approche générale du cas le plus général e) de 5.3.2. Cette approche peut être utilisée pour traiter tous les autres cas, et utilise des méthodes numériques stables et complexes. Les cas a) à c) de 5.3.2 peuvent cependant être traités avec des opérations élémentaires qui peuvent être mises en œuvre dans un tableur par exemple. Les cas d) et e) de 5.3.2 nécessitent certaines opérations matricielles, qui sont simples et directes à mettre en œuvre avec un langage informatique prenant en charge une arithmétique matricielle; ces opérations ne sont cependant pas très appropriées aux calculs sur tableur.

5.5 Incertitudes et covariances associées aux paramètres de la fonction d'étalonnage

5.5.1 Dans tous les cas considérés, les estimations des paramètres de la fonction d'étalonnage peuvent être exprimées (explicitement ou implicitement) comme des fonctions des données de mesure. Les principes du GUM [Guide ISO/CEI 98-3:2008] peuvent être appliqués pour dériver les incertitudes et les covariances associées aux données mesurées à l'aide de ces fonctions pour obtenir celles qui sont associées aux estimations des paramètres. Ainsi, les données mesurées sont utilisées pour fournir les estimations de a et b des paramètres de la fonction d'étalonnage, et pour évaluer les incertitudes-types $u(a)$ et $u(b)$ et la covariance $\mathrm{cov}(a, b)$ associée à ces estimations. Dans les cas a) et d) de 5.3.2, la propagation des incertitudes est exacte puisque les estimations des paramètres peuvent être exprimées comme des combinaisons linéaires des entrées y_i. Dans les autres cas où les estimations des paramètres ne peuvent pas être exprimées de cette manière, la propagation est approximative, sur la base de la linéarisation relative aux estimations des paramètres. Pour bon nombre de besoins, l'approximation due à la linéarisation sera suffisamment exacte.

NOTE Lorsque la propagation des incertitudes est approximative, notamment si les incertitudes impliquées sont grandes (par exemple, dans certains domaines de mesures biologiques), une approche basée sur la propagation des distributions peut être utilisée. Cette approche [Guide 98-3:2008/Suppl.1:2008] utilise la méthode de Monte Carlo (ne faisant pas l'objet de la présente Spécification technique).

5.5.2 Les principaux éléments de sortie dans le cadre de la description de la fonction d'étalonnage linéaire sont le vecteur $\boldsymbol{a}$ des estimations des paramètres de dimension 2 x 1 et la matrice des covariances $\boldsymbol{U_a}$ de dimension 2 x 2 donnés par

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{U_a} = \begin{bmatrix} u^2(a) & \mathrm{cov}(a,b) \\ \mathrm{cov}(b,a) & u^2(b) \end{bmatrix} \qquad (1)$$

où $u(a)$ et $u(b)$ sont les incertitudes-types associées à a et b, respectivement, et $\mathrm{cov}(a, b) = \mathrm{cov}(b, a)$ est la covariance associée à a et b.

