TCVN **TIÊU CHUẨN QUỐC GIA**

TCVN 12741:2019

ISO/TS 28037:2010

Xuất bản lần 1

XÁC ĐỊNH VÀ SỬ DỤNG HÀM HIỆU CHUẨN ĐƯỜNG THẲNG

Determination and use of straight-line calibration functions–

HÀ NỘI - 2019

Mục lục

Lời nói đầu

TCVN 12741:2019 hoàn toàn tương đương với ISO/TS 28037:2010.

TCVN 12741:2019 do Ban kỹ thuật tiêu chuẩn quốc gia TCVN/TC 69 *Ứng dụng các phương pháp thống kê* biên soạn, Tổng cục Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng đề nghị, Bộ Khoa học và Công nghệ công bố.

Lời giới thiệu

Hiệu chuẩn là một phần thiết yếu của nhiều quy trình đo và thường bao gồm việc làm khớp dữ liệu đo được với hàm hiệu chuẩn mô tả rõ nhất mối quan hệ của một biến này với biến khác. Tiêu chuẩn này xét các hàm hiệu chuẩn đường thẳng mô tả biến phụ thuộc Y như hàm của biến độc lập X. Mối quan hệ đường thẳng phụ thuộc vào phần chắn A và độ dốc B của đường thẳng. A và B được gọi là các tham số của đường thẳng. Mục đích của quy trình hiệu chuẩn là để xác định các ước lượng a và b của A và B đối với một hệ thống đo cụ thể đang xem xét trên cơ sở dữ liệu đo (x_i, y_i), $i = 1,\dots, m$, cung cấp bởi hệ thống đo. Dữ liệu đo có độ không đảm bảo kèm theo, nghĩa là sẽ có độ không đảm bảo gắn với a và b. Tiêu chuẩn này mô tả cách thức a và b có thể được xác định dựa trên dữ liệu và thông tin về độ không đảm bảo kèm theo. Tiêu chuẩn cũng cung cấp phương tiện để đánh giá độ không đảm bảo kèm theo các ước lượng này. Việc xử lý độ không đảm bảo trong tiêu chuẩn này được tiến hành theo cách thức nhất quán với TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), *Độ không đảm bảo đo – Phần 3: Hướng dẫn trình bày độ không đảm bảo đo (GUM:1995).*

Với thông tin độ không đảm bảo kèm theo dữ liệu đo, phương pháp thích hợp có thể được quy định để xác định các ước lượng của tham số hàm hiệu chuẩn. Thông tin về độ không đảm bảo này có thể bao gồm hiệu ứng hiệp phương sai định lượng, liên quan đến sự phụ thuộc giữa một số hoặc tất cả các đại lượng liên quan.

Khi mô hình đường thẳng đã được khớp với dữ liệu, cần xác định xem mô hình và dữ liệu có thống nhất với nhau hay không. Trong trường hợp thống nhất, mô hình thu được có thể sử dụng để dự đoán giá trị x của biến X tương ứng với giá trị đo được y của biến Y cung cấp bởi cùng một hệ thống đo. Cũng có thể sử dụng mô hình này để đánh giá độ không đảm bảo kèm theo các tham số hàm hiệu chuẩn và độ không đảm bảo kèm theo giá trị dự đoán x.

Do đó, việc xác định và sử dụng hàm hiệu chuẩn đường thẳng có thể được xem là gồm năm bước:

1 Thu thập thông tin về độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với dữ liệu đo – mặc dù phụ thuộc vào lĩnh vực đo cụ thể, các ví dụ được cung cấp trong tiêu chuẩn này;

2 Cung cấp ước lượng tốt nhất của các tham số đường thẳng;

3 Xác định giá trị sử dụng của mô hình, cả về dạng chức năng (dữ liệu có phản ánh mối quan hệ đường thẳng không"?) và về mặt thống kê (độ trải của dữ liệu có nhất quán với độ không đảm bảo kèm theo của chúng không?) bằng cách sử dụng kiểm nghiệm Khi-bình phương;

4 Thu được độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai gắn với ước lượng của các tham số đường thẳng;

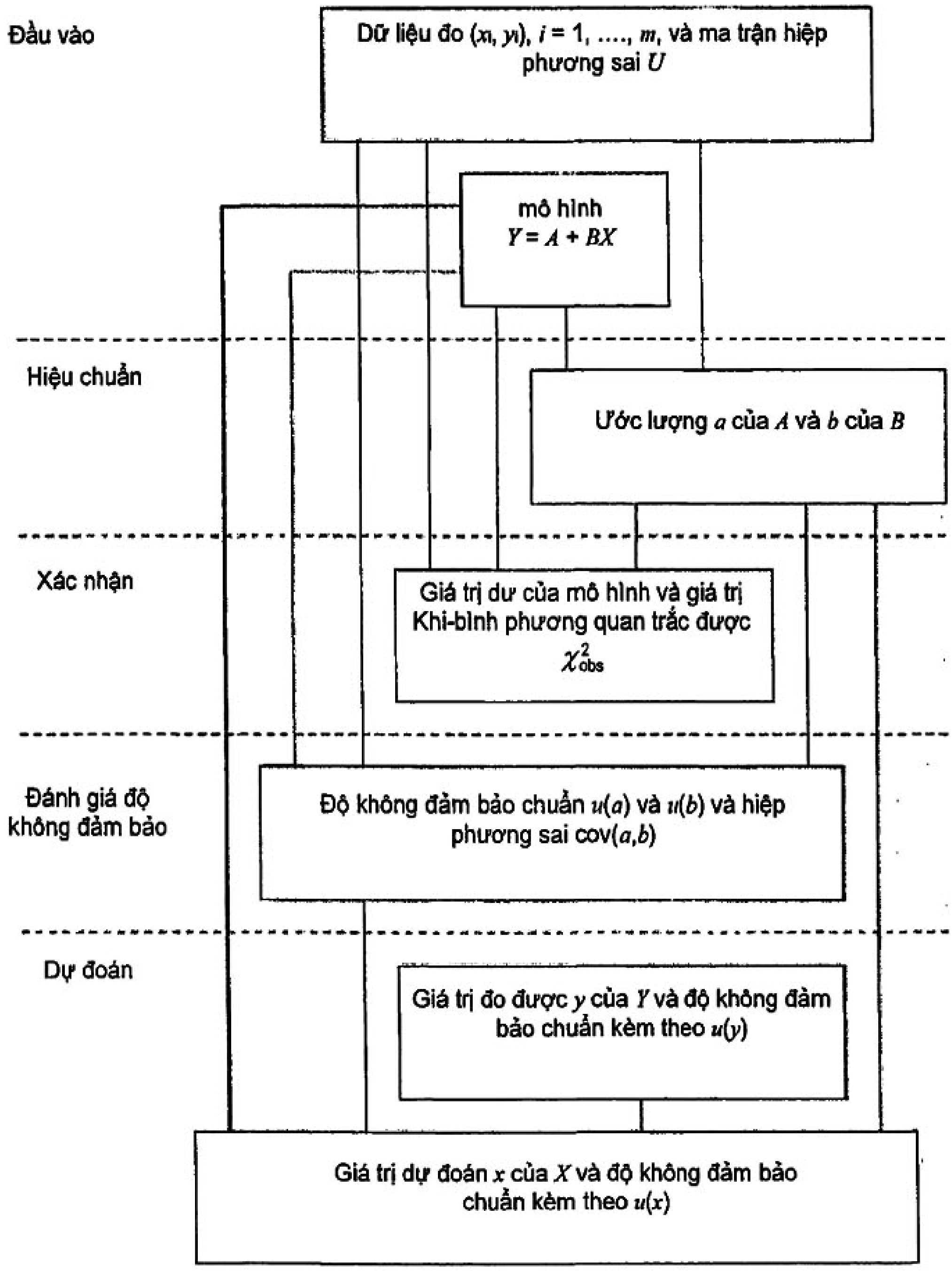
5 Sử dụng hàm hiệu chuẩn để dự đoán, tức là, xác định ước lượng x của biến X và độ không đảm bảo kèm theo tương ứng với giá trị đo được y của biến Y và độ không đảm bảo kèm theo.

Các bước trên đây được trình bày bằng sơ đồ trên Hình 1.

Mục đích chính của tiêu chuẩn này là để xem xét các bước từ 2 đến 5. Do đó, như một phần bước 1, trước khi sử dụng tiêu chuẩn này, người sử dụng sẽ cần cung cấp độ không đảm bảo chuẩn, và hiệp phương sai nếu liên quan, gắn với giá trị Y đo được và, khi thích hợp, độ không đảm bảo chuẩn, và hiệp phương sai nếu liên quan, gắn với giá trị X đo được. Cần tính đến các nguyên tắc của GUM khi đánh giá độ không đảm bảo này dựa trên mô hình đo cụ thể cho lĩnh vực liên quan.

TCVN 9598:2013 (ISO 11095:1996) [14] liên quan đến hiệu chuẩn tuyến tính sử dụng mẫu chuẩn. Những khác biệt so với tiêu chuẩn này được trình bày trong Bảng 1.

Phương pháp số được cho dựa trên Tài liệu tham khảo [6].



Hình 1 – Tóm tắt các bước trong việc xác định và sử dụng hàm hiệu chuẩn đường thẳng

Bảng 1 – Khác biệt giữa TCVN 9598:2013 (ISO 11095:1996) và tiêu chuẩn này

Đặc điểm	TCVN 9598:2013 (ISO 11095:1996)	Tiêu chuẩn này
Đề cập cụ thể đến mẫu chuẩn	Có	Tổng quát hơn
X-giá trị giả định là biết chính xác	Có	Thông tin độ không đảm bảo chung hơn
Tất cả các giá trị đo thu được một cách độc lập	Có	Thông tin độ không đảm bảo chung hơn
Thuật ngữ thống nhất với GUM	Không	Có
Số kiểu cấu trúc độ không đảm bảo được xử lý	Hai	Năm, bao gồm trường hợp tổng quát nhất
Chỉ độ không đảm bảo gắn với sai số ngẫu nhiên	Có	Thông tin độ không đảm bảo tổng quát hơn
Kiểm nghiệm tính nhất quán	ANOVA	Khi-bình phương
Độ không đảm bảo gắn với các dự đoán	Đặc biệt	Tương thích với GUM

Xác định và sử dụng hàm hiệu chuẩn đường thẳng

Determination and use of straight-line calibration functions

1 Phạm vi áp dụng

Tiêu chuẩn này đề cập đến hàm hiệu chuẩn tuyến tính, tức hàm hiệu chuẩn đường thẳng, mô tả mối quan hệ giữa hai biến X và Y, gọi là hàm có dạng $Y = A + BX$. Mặc dù có nhiều nguyên tắc áp dụng cho các loại hàm hiệu chuẩn tổng quát hơn, nhưng bất kỳ khi nào có thể, các cách tiếp cận được mô tả đều khai thác dạng đơn giản của hàm hiệu chuẩn đường thẳng.

Giá trị của các tham số A và B, được xác định trên cơ sở các điểm dữ liệu đo được (x_i, y_i), $i = 1,..., m$. Nhiều trường hợp khác nhau được xem xét liên quan đến tính chất của độ không đảm bảo kèm theo các dữ liệu này. Không có giả định nào được đưa ra về sai số liên quan đến y_i là phương sai không đổi (có phương sai bằng nhau), và tương tự với x_i khi sai số là đáng kể.

Ước lượng của các tham số A và B được xác định bằng cách sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu. Điểm nhấn mạnh của tiêu chuẩn này là việc chọn phương pháp bình phương tối thiểu thích hợp nhất cho loại dữ liệu đo, cụ thể là các phương pháp phản ánh độ không đảm bảo kèm theo. Loại ma trận hiệp phương sai tổng quát nhất gắn với dữ liệu đo được xử lý, nhưng những trường hợp đặc biệt quan trọng dẫn đến các tính toán đơn giản hơn sẽ được mô tả chi tiết.

Đối với tất cả các trường hợp xem xét, phương pháp xác nhận việc sử dụng hàm hiệu chuẩn đường thẳng và đánh giá độ không đảm bảo, hiệp phương sai kèm theo các ước lượng tham số sẽ được đưa ra.

Tiêu chuẩn này cũng mô tả việc sử dụng các ước lượng tham số của hàm hiệu chuẩn và độ không đảm bảo, hiệp phương sai kèm theo của chúng để dự đoán giá trị của X và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo dựa vào giá trị đo được của Y và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo.

CHÚ THÍCH 1: Tiêu chuẩn này không đưa ra cách xử lý chung các giá trị bất thường trong dữ liệu đo, mặc dù kiểm nghiệm hiệu lực đã cho có thể sử dụng làm cơ sở để xác định dữ liệu không thống nhất.

CHÚ THÍCH 2: Tiêu chuẩn này mô tả phương pháp đánh giá độ không đảm bảo gắn với dữ liệu đo trong trường hợp độ không đảm bảo chỉ được biết dựa vào hệ số thang đo (Phụ lục E).

2 Tài liệu viện dẫn

Các tài liệu viện dẫn trong tiêu chuẩn này rất cần thiết cho việc áp dụng tiêu chuẩn. Đối với các tài liệu có ghi năm công bố thì áp dụng bản được nêu. Đối với các tài liệu không ghi năm công bố thì áp dụng phiên bản mới nhất, bao gồm cả các sửa đổi.

TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007), Từ vựng quốc tế về đo lường học – Khái niệm, thuật ngữ chung và cơ bản (VIM)

TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), Độ không đảm bảo đo – Phần 3: Hướng dẫn trình bày độ không đảm bảo đo (GUM:1995)

3 Thuật ngữ và định nghĩa

Tiêu chuẩn này áp dụng các thuật ngữ và định nghĩa trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007) và các thuật ngữ và định nghĩa dưới đây.

Giải thích các ký hiệu chính được nêu trong Phụ lục G.

3.1

Giá trị đại lượng đo được (measured quantity value)
Giá trị đại lượng đại diện cho kết quả đo.

[TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007), 2.10]

3.2

Độ không đảm bảo đo (measurement uncertainty)
Tham số không âm đặc trưng cho sự phân tán của các giá trị đại lượng được quy cho đại lượng đo, trên cơ sở thông tin đã sử dụng.

[TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007), 2.26]

3.3

Độ không đảm bảo đo chuẩn (standard measurement uncertainty)
Độ không đảm bảo đo được thể hiện là độ lệch chuẩn.

[TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007), 2.30]

3.4

Hiệp phương sai gắn với hai giá trị đại lượng (covariance associated with two quantity values)
Tham số đặc trưng cho sự phụ thuộc lẫn nhau của các giá trị đại lượng được quy cho hai đại lượng đo, trên cơ sở thông tin đã sử dụng.

3.5

Ma trận hiệp phương sai đo (measurement covariance matrix)
Ma trận hiệp phương sai (covariance matrix)
Ma trận kích thước $N \times N$ gắn với ước lượng véc tơ của đại lượng véc tơ kích thước $N \times 1$, chứa trên

đường chéo của nó các bình phương của độ không đảm bảo chuẩn gắn với các thành phần tương ứng của ước lượng véc tơ của đại lượng véc tơ, và, trên các vị trí ngoài đường chéo của nó, là các hiệp phương sai gắn với các cặp thành phần của ước lượng véc tơ của đại lượng véc tơ.

CHÚ THÍCH 1: Ma trận hiệp phương sai U_x kích thước N x N gắn với ước lượng véc tơ x của đại lượng véc tơ X có dạng

$$U_x = \begin{bmatrix} \mathrm{cov}(x_1, x_1) & \cdots & \mathrm{cov}(x_1, x_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{cov}(x_N, x_1) & \cdots & \mathrm{cov}(x_N, x_N) \end{bmatrix},$$

trong đó $\mathrm{cov}(x_i, x_i) = u^2(x_i)$ là phương sai (độ không đảm bảo chuẩn bình phương) gắn với x_i và $\mathrm{cov}(x_i, x_j)$ là hiệp phương sai gắn với x_i và x_j. $\mathrm{cov}(x_i, x_j) = 0$ nếu các thành phần X_i và X_j của X là không tương quan.

CHÚ THÍCH 2: Các hiệp phương sai còn gọi là độ không đảm bảo tương hỗ.

CHÚ THÍCH 3: Ma trận hiệp phương sai còn gọi là ma trận phương sai-hiệp phương sai.

CHÚ THÍCH 4: Định nghĩa lấy từ [ISO/IEC Guide 98-3:2008/Suppl. 1:2008, định nghĩa 3.11 [13].

3.6

Mô hình đo (measurment model)

Hệ thức toán học trong đó tất cả các đại lượng đã biết liên quan đến phép đo.

[TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007), 2.48]

3.7

Mô hình hàm (functional model)

Mô hình thống kê liên quan đến các sai số gắn với biến phụ thuộc.

3.8

Mô hình cấu trúc (structural model)

Mô hình thống kê liên quan đến các sai số gắn với biến độc lập và biến phục thuộc.

3.9

Hiệu chuẩn (calibration)

Hoạt động, trong những điều kiện quy định, bước thứ nhất là thiết lập mối liên hệ giữa các giá trị đại lượng có độ không đảm bảo đo do chuẩn đo lường cung cấp và các số chỉ tương ứng với độ không đảm bảo đo kèm theo và bước thứ hai là sử dụng thông tin này thiết lập mối liên hệ để nhận được kết quả đo từ số chỉ.

CHÚ THÍCH 1: Hiệu chuẩn có thể diễn tả bằng một tuyên bố, hàm hiệu chuẩn, biểu đồ hiệu chuẩn, đường cong hiệu chuẩn, hoặc bảng hiệu chuẩn. Trong một số trường hợp nó có thể bao gồm sự hiệu chính cộng hoặc nhân của số chỉ với độ không đảm bảo đo kèm theo.

CHÚ THÍCH 2: Không được nhầm lẫn hiệu chuẩn với hiệu chỉnh hệ thống đo, thường gọi sai là "tự hiệu chuẩn", cũng không được nhầm lẫn với kiểm định của hiệu chuẩn.

CHÚ THÍCH 3: Thông thường chỉ riêng bước đầu tiên trong định nghĩa trên được hiểu là hiệu chuẩn.

[TCVN 6165:2009 (ISO/IEC Guide 99:2007), 2.39]

3.10

Phân bố xác suất (probability distribution)

<biến ngẫu nhiên> hàm đưa ra xác suất mà biến ngẫu nhiên lấy giá trị bất kỳ đã cho hoặc thuộc tập hợp các giá trị đã cho.

CHÚ THÍCH 1: Xác suất trên toàn bộ tập hợp giá trị của biến ngẫu nhiên bằng 1.

CHÚ THÍCH 2: Phân bố xác suất được gọi là đơn biến khi nó liên quan đến một biến ngẫu nhiên (vô hướng), và đa biến khi nó liên quan đến véc tơ của các biến ngẫu nhiên. Phân bố xác suất đa biến còn được mô tả là phân bố đồng thời.

CHÚ THÍCH 3: Phân bố xác suất có thể có dạng hàm phân bố hoặc hàm mật độ xác suất.

CHÚ THÍCH 4: Định nghĩa và Chú thích 1 lấy từ TCVN 8244-1:2010 (ISO 3534-1:2006), định nghĩa 2.11 và TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), định nghĩa C.2.3; Chú thích 2 và 3 lấy từ ISO/IEC Guide 98-3:2008/Suppl. 1:2008, định nghĩa 3.1 [13].

3.11

Phân bố chuẩn (normal distribution)

Phân bố xác suất của biến ngẫu nhiên liên tục X có hàm mật độ xác suất

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

với $-\infty < \xi < +\infty$

CHÚ THÍCH 1: μ là kỳ vọng và σ là độ lệch chuẩn của X.

CHÚ THÍCH 2: Phân bố chuẩn còn được gọi là phân bố Gauss.

CHÚ THÍCH 3: Định nghĩa và Chú thích 1 lấy từ TCVN 8244-1:2010 (ISO 3534-1:2006), định nghĩa 2.50; Chú thích 2 lấy từ TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), định nghĩa C.2.14.

3.12

Phân bố t (t-distribution)

Phân bố xác suất của biến ngẫu nhiên liên tục X có hàm mật độ xác suất

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

với $-\infty < \xi < +\infty$, với tham số ν, số nguyên dương, là bậc tự do của phân bố, trong đó

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

là hàm gamma.

[ISO/IEC Guide 98-3:2008/Suppl. 1:2008, định nghĩa 3.5].

3.13

Phân bố Khi-bình phương (chi-squared distribution)

Phân bố χ^2 (χ^2 distribution)

Phân bố xác suất của biến ngẫu nhiên liên tục X có hàm mật độ xác suất

$$g_X(\xi)=\frac{\xi^{(\nu/2)-1}}{2^{\nu/2}\Gamma(\nu/2)}\exp\left(-\frac{\xi}{2}\right),$$

với $0 \le \xi < +\infty$, với tham số ν, số nguyên dương, trong đó Γ là hàm gamma.

CHÚ THÍCH: Tổng bình phương của ν biến chuẩn chuẩn hóa độc lập là biến ngẫu nhiên χ^2 với tham số ν; khi đó ν được gọi là bậc tự do.

3.14

Ma trận xác định dương (positive definite matrix)

Ma trận M kích thước n x n có tính chất $z^T Mz > 0$ đối với mọi véc tơ z khác 0 kích thước n x 1.

3.15

Ma trận nửa xác định dương (positive semi-definite matrix)

Ma trận M kích thước n x n có tính chất $z^T Mz \ge 0$ đối với mọi véc tơ z khác 0 kích thước n x 1.

4 Quy ước và ký hiệu

Với mục đích của tiêu chuẩn này, các quy ước và ký hiệu sau được sử dụng.

4.1 X được gọi là biến độc lập và Y là biến phụ thuộc ngay cả khi hiểu biết về X và Y là 'có thể hoán đổi' ví dụ như trong Điều 7.

4.2 Đại lượng A và B được gọi là các tham số của hàm hiệu chuẩn đường thẳng $Y = A + BX$. A và B còn được dùng để ký hiệu các biến (giả) trong biểu thức liên quan đến các tham số hàm hiệu chuẩn.

4.3 Đại lượng X_i và Y_i được dùng làm biến (giả) để ký hiệu cho tọa độ của điểm dữ liệu thứ i.

4.4 Các hằng số A^* và B^* là giá trị (chưa biết) của A và B xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng $Y = A^* + B^*X$ đối với hệ thống đo cụ thể đang xét.

4.5 Các hằng số X_i^* và Y_i^* là tọa độ (chưa biết) của điểm dữ liệu thứ i do hệ thống đo cung cấp thỏa mãn $Y_i^* = A^* + B^*X_i^*$.

4.6 x_i và y_i là giá trị đo được của tọa độ của điểm dữ liệu thứ i.

4.7 a và b là các ước lượng của tham số hàm hiệu chuẩn đối với hệ thống đo.

4.8 x_i^* và y_i^* là các ước lượng của tọa độ của điểm dữ liệu thứ i thỏa mãn $y_i^* = a + bx_i^*$.

4.9 Véc tơ kích thước m x 1 được ký hiệu là:

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

và ma trận kích thước m x n được ký hiệu là:

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

Kích thước của véc tơ hoặc ma trận luôn được quy định để tránh nhầm lẫn có thể có.

4.10 T ký hiệu cho chuyển vị.

4.11 Ma trận 0 được ký hiệu bằng **0** và véc tơ đơn vị được ký hiệu là **1**.

4.12 Một số ký hiệu có nhiều hơn một nghĩa. Bối cảnh sẽ làm rõ việc sử dụng.

4.13 Các số trình bày trong các bảng tới số chữ số thập phân xác định là các đại diện được làm tròn chính xác của các số lưu giữ ở độ chụm cao hơn, ví dụ như trong trường hợp bảng tính. Do đó, có thể nhận thấy sự không thống nhất nhỏ giữa tổng cột hiển thị và tổng cột các số hiển thị.

4.14 Trong một số bảng, số điều nhỏ ở trên một cột hoặc các cột chỉ ra nơi mà công thức được cho để xác định các giá trị bên dưới.

4.15 Trong các ví dụ, trong khi giá trị dữ liệu được cung cấp với độ chụm đã cho thì các kết quả tính toán được cung cấp với độ chụm cao hơn để cho phép người sử dụng so sánh kết quả khi thực hiện tính toán.

5 Các nguyên tắc hiệu chuẩn đường thẳng

5.1 Khái quát

5.1.1 Điều này xem xét hệ thức $Y = A + BX$ mô tả biến phụ thuộc Y (còn gọi là 'đáp ứng') như hàm của biến độc lập X (còn gọi là 'mô phỏng') có thể được xác định từ dữ liệu đo như thế nào. Trong bối cảnh hiệu chuẩn, dữ liệu đo phát sinh khi phương tiện đo được quy định bởi các giá trị A^* và B^* (chưa biết) của tham số hàm hiệu chuẩn được 'mô phỏng' bằng vật mẫu với giá trị hiệu chuẩn của X_i được cho theo đơn vị của chuẩn, của tính chất của vật mẫu, và 'đáp ứng' tương ứng hoặc số chỉ Y_i của phương tiện được ghi lại. Hệ thức này cung cấp đáp ứng Y của hệ thống dựa vào vật mẫu có đại lượng được hiệu chuẩn X. Quá trình này được gọi là 'đánh giá tiếp'. Hữu ích hơn trong thực tiễn là hệ thức này cho phép chuyển đổi đáp ứng đo được y của Y thành ước lượng x, theo các đơn vị của chuẩn, của tính chất X của vật mẫu. Quá trình này được gọi là 'đánh giá ngược' hoặc 'dự đoán'.

5.1.2 Việc hiệu chuẩn hệ thống đo cần tính đến độ không đảm bảo đo, và, nếu có, hiệp phương sai gắn với dữ liệu đo. Đầu ra của quy trình hiệu chuẩn là hàm hiệu chuẩn được sử dụng cho dự đoán (và, nếu cần, đánh giá tiếp). Đầu ra cũng bao gồm độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai gắn với ước lượng a và b của tham số mô tả hàm hiệu chuẩn, được sử dụng để đánh giá độ không đảm bảo chuẩn gắn với dự đoán (và đánh giá tiếp).

5.2 Đầu vào để xác định hàm hiệu chuẩn

5.2.1 Dữ liệu đo

Thông tin yêu cầu để xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng là dữ liệu đo và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo cùng với hiệp phương sai. Trong tiêu chuẩn này, dữ liệu đo được ký hiệu bằng (x_i, y_i), $i = 1,\ldots, m$, tức là m cặp giá trị đại lượng đo được của X và Y. Giả định rằng m ít nhất bằng hai và các giá trị của x_i không bằng nhau.

CHÚ THÍCH: Độ không đảm bảo kèm theo các ước lượng a và b thường giảm khi m tăng. Do đó, hiệu chuẩn cần hướng tới sử dụng càng nhiều điểm dữ liệu đo được nếu khả thi về kinh tế.

5.2.2 Độ không đảm bảo kèm theo và hiệp phương sai

Độ không đảm bảo chuẩn gắn với x_i và y_i được ký hiệu tương ứng là $u(x_i)$ và $u(y_i)$. Hiệp phương sai gắn với x_i và x_j được ký hiệu là $\text{cov}(x_i, x_j)$. Tương tự, giá trị gắn với y_i và y_j và với x_i và y_j được ký hiệu tương ứng là $\text{cov}(y_i, y_j)$ và $\text{cov}(x_i, y_j)$. Phụ lục D chỉ ra cách độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với biến đáp ứng và biến mô phỏng đo được có thể được đánh giá và đưa ra giải thích về thông tin độ không đảm bảo đó. Thông tin hoàn chỉnh về độ không đảm bảo được trình bày bằng dãy các phần tử (ma trận) U kích thước $2m$ x $2m$ chứa các phương sai (độ không đảm bảo chuẩn bình phương) $u^2(x_i)$ và $u^2(y_i)$ và các hiệp phương sai:

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

Đối với nhiều ứng dụng, một số hoặc tất cả các hiệp phương sai được lấy bằng 0 (xem 5.3).

CHÚ THÍCH: Tiêu chuẩn này liên quan đến các vấn đề trong đó $u(x_i)$ hoặc $u(y_i)$thường khác nhau.

5.3 Xác định hàm hiệu chuẩn

5.3.1 Đầu vào để xác định hàm hiệu chuẩn là dữ liệu đo, độ không đảm bảo kèm theo và các hiệp phương sai có thể có. Cho trước các tham số A và B, đầu vào có thể sử dụng để cung cấp thước đo sai lệch của điểm dữ liệu thứ i (x_i, y_i) so với đường thẳng $Y = A + BX$. Các ước lượng a và b được xác định bằng cách tối thiểu hóa tổng bình phương các sai lệch này, hoặc thước đo chung hơn khi mọi hiệp phương sai khác 0. Điều này đạt được như thế nào tùy thuộc vào 'cấu trúc độ không đảm bảo' gắn với dữ liệu đo. Cấu trúc này liên quan đến câu trả lời cho các câu hỏi sau đây:

i) Độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được x_i là không đáng kể?

ii) Hiệp phương sai gắn với cặp giá trị đo được là không đáng kể?

5.3.2 Trong tiêu chuẩn này xem xét các trường hợp sau đây, được cho theo thứ tự phức tạp tăng dần và tùy thuộc vào câu trả lời cho các câu hỏi ở 5.3.1:

a) Chỉ có độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được y_i và tất cả các hiệp phương sai gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể (Điều 6);

b) Độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được x_i và y_i và tất cả các hiệp phương sai gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể (Điều 7);

c) Độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được x_i và y_i và chỉ các hiệp phương sai gắn với cặp (x_i, y_i) (Điều 8);

d) Chỉ có độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được y_i và chỉ các hiệp phương sai gắn với y_i và y_j ($i \neq j$) (Điều 9);

e) Trường hợp chung nhất trong đó có độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được x_i và y_i và hiệp phương sai gắn với tất cả các cặp giá trị của x_i, x_j, y_k và y_l (Điều 10).

5.3.3 Đối với từng trường hợp trong 5.3.2 được cho

a) dữ liệu đo và cấu trúc độ không đảm bảo quy định,

b) mô hình thống kê tương ứng,

c) vấn đề bình phương tối thiểu nhắm đến,

d) các bước tính toán,

e) tính chất của mô hình thống kê,

f) giá trị sử dụng của mô hình,

g) tổ chức tính toán cho máy tính, khi thích hợp,

h) thuật toán số, khi thích hợp, và

i) một hoặc nhiều ví dụ thực tế.

5.4 Xử lý số

Phụ lục C đưa ra cách tiếp cận chung cho trường hợp tổng quát nhất là e) trong 5.3.2. Nó có thể sử dụng để xử lý tất cả các trường hợp khác và sử dụng các phương pháp tinh vi, ổn định về số học. Tuy nhiên, các trường hợp từ a) đến c) trong 5.3.2 có thể được xử lý bằng cách sử dụng các thao tác cơ bản, ví dụ, có thể thực hiện trong bảng tính. Các trường hợp d) và e) trong 5.3.2 đòi hỏi một số thao tác ma trận, dễ áp dụng theo ngôn ngữ máy tính hỗ trợ số học ma trận, nhưng không phù hợp lắm cho tính bằng bảng tính.

5.5 Độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với tham số hàm hiệu chuẩn

5.5.1 Đối với tất cả các trường hợp xem xét, các ước lượng của tham số hàm hiệu chuẩn có thể được thể hiện (rõ ràng hoặc hàm ý) như hàm của dữ liệu đo. Các nguyên tắc của GUM [TCVN 9595-3:2013

(ISO/IEC Guide 98-3:2008)] có thể được áp dụng để lan truyền độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với dữ liệu đo thông qua các hàm này để thu được giá trị gắn với các ước lượng tham số này. Theo cách này, dữ liệu đo được sử dụng để cung cấp ước lượng a và b của tham số hàm hiệu chuẩn, và để đánh giá độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$ và hiệp phương sai cov(a,b) gắn với các ước lượng này. Đối với trường hợp a) và d) trong 5.3.2, sự lan truyền là chính xác vì ước lượng tham số có thể được biểu thị như tổ hợp tuyến tính của các đầu vào y_i. Đối với các trường hợp khác, trong đó ước lượng tham số không thể biểu thị như vậy thì lan truyền là gần đúng, dựa trên tuyến tính hóa về ước lượng tham số. Vì nhiều mục đích, giá trị gần đúng thu được bằng phép tuyến tính hóa sẽ đủ chính xác.

CHÚ THÍCH: Khi lan truyền độ không đảm bảo là gần đúng, và đặc biệt nếu độ không đảm bảo liên quan lớn (ví dụ, trong một số lĩnh vực đo sinh học), thì có thể sử dụng cách tiếp cận dựa trên lan truyền phân bố. Cách tiếp cận này [ISO/IEC Guide 98-3:2008/Suppl. 1:2008] sử dụng phương pháp Monte Carlo (không đề cập trong tiêu chuẩn này).

5.5.2 Các đầu ra chính trong mô tả hàm hiệu chuẩn đường thẳng là véc to ước lượng tham số $\boldsymbol{a}$ kích thước 2 x 1 và ma trận hiệp phương sai $\boldsymbol{U_a}$ kích thước 2 x 2 được cho bởi

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

trong đó $u(a)$ và $u(b)$ là độ không đảm bảo chuẩn gắn với a và b, tương ứng, và cov(a,b) = cov(b,a) là hiệp phương sai gắn với a và b.

5.6 Xác nhận giá trị sử dụng của mô hình

5.6.1 Trong việc xác định ước lượng a và b của tham số hàm hiệu chuẩn đường thẳng, giả định rằng mô hình $Y = A + BX$ là hợp lý và độ không đảm bảo gắn với dữ liệu đo đưa ra thước đo tin cậy về độ lệch của dữ liệu đo so với đường thẳng. Khi a và b đã được xác định, độ lệch thực tế của điểm dữ liệu so với hàm hiệu chuẩn khớp tốt nhất có thể được đánh giá dựa trên độ lệch dự đoán. So sánh này liên quan đến thước đo tổng hợp độ lệch biểu thị bằng tổng các bình phương χ^2_{obs} của m phần dư có trọng số, phần dư có trọng số thứ i là thước đo độ lệch của điểm dữ liệu thứ i so với đường thẳng, hoặc, khi hiệp phương sai gắn với điểm dữ liệu thứ i (x_i, y_i) là khác 0 so với một dạng tổng quát hơn. Nếu χ^2_{obs} lớn hơn nhiều so với dự kiến thì trên cơ sở thống kê, có lý do để đặt ra câu hỏi về hiệu lực của các giả định mô hình.

5.6.2 Từ quan điểm thống kê, dữ liệu đo có thể được coi như các thể hiện của biến ngẫu nhiên. Nếu đã biết phân bố xác suất đặc trưng cho các biến ngẫu nhiên này thì về nguyên tắc có thể xác định phân bố xác suất cho thước đo tổng hợp độ lệch trong 5.6.1. Khi đó, xác suất có thể được tính là χ^2_{obs}, coi như được lấy từ phân bố tổng hợp này, vượt quá phân vị cụ thể bất kỳ của phân bố. Tuy nhiên, vì thông tin về các đại lượng này thường giới hạn ở bản thân các giá trị đo được và phương sai kèm theo (lấy là kỳ vọng và phương sai, tương ứng, của biến ngẫu nhiên đặc trưng bởi các phân bố này), nên không có đủ thông tin để xác định phân bố cho thước đo này. Thay vào đó, việc đánh giá hiệu lực được thực hiện với giả định rằng phân bố của các đại lượng là phân bố chuẩn. Với giả định này, duy trì từ giờ về sau, ít nhất là cho mục đích xác nhận giá trị sử dụng, phân bố cho thước đo này là χ_v^2 với $v = m - 2$ bậc tự do. Theo đó, xác suất mà χ_{obs}^2 vượt quá phân vị cụ thể bất kỳ của χ_v^2 có thể được xác định (xem 6.3, 7.3, 9.3 và 10.3). Sử dụng phân vị 95 %.

CHÚ THÍCH 1: Nếu χ_{obs}^2 vượt quá phân vị 95 % của χ_v^2 thì hàm hiệu chuẩn đường thẳng có thể được coi như không giải thích cho dữ liệu đủ tốt vì mục đích thực tế. Trong trường hợp này, dữ liệu và độ không đảm bảo kèm theo cần được kiểm tra về khả năng sai lỗi. Hàm hiệu chuẩn bao gồm đa thức của X có bậc 2 hoặc cao hơn hoặc một dạng toán học khác có thể được bàn đến; xem xét như vậy nằm ngoài phạm vi tiêu chuẩn này.

CHÚ THÍCH 2: Có khả năng mô hình 'quá tốt' ở chỗ giá trị quan trắc được χ_{obs}^2 nhỏ hơn nhiều so với giá trị kỳ vọng. Khả năng này thường ứng với độ không đảm bảo kèm theo dữ liệu đo được trích ra quá lớn và sẽ không được xem xét thêm trong tiêu chuẩn này.

5.6.3 Để thu được càng nhiều giá trị càng tốt từ hàm hiệu chuẩn, mong muốn là độ không đảm bảo đầu vào cần được rút ra trước khi xác định tham số hàm hiệu chuẩn chứ không phải được đánh giá khi khớp với dữ liệu đã được xác định, với độ không đảm bảo kèm theo ước lượng từ dữ liệu hoặc biết theo hệ số thang đo. Trường hợp đề cập sau được xem xét trong Phụ lục E.

5.6.4 Nếu trong trường hợp cụ thể bất kỳ, việc xác nhận giá trị của mô hình không đạt, tức là χ_{obs}^2 vượt quá phân vị 95 % của χ_v^2 (xem 5.6.2), thì độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$, hiệp phương sai $\mathrm{cov}(a,b)$ tính được (xem 5.5.2) cần được coi là không đáng tin cậy, khi độ không đảm bảo gắn với giá trị dự đoán (xem 5.7).

5.7 Sử dụng hàm hiệu chuẩn

5.7.1 Hàm hiệu chuẩn thường được sử dụng cho việc dự đoán (đánh giá ngược) trong đó, dựa vào ước lượng của Y và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo, giá trị tương ứng của X được ước lượng và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo được đánh giá. Việc đánh giá độ không đảm bảo đề cập sau sử dụng độ không đảm bảo chuẩn gắn với các ước lượng a và b cũng như hiệp phương sai kèm theo của chúng. Xem 11.1.

5.7.2 Đôi khi cần có đánh giá tiếp trong đó giá trị tương ứng của Y thu được cùng với độ không đảm bảo chuẩn kèm theo, dựa vào ước lượng của X và độ không đảm bảo kèm theo, ví dụ, khi so sánh các hiệu chuẩn của một tập hợp các phương tiện đo tương tự nhau. Xem 11.2.

CHÚ THÍCH: Giả định rằng điều kiện đo duy trì trong quá trình hiệu chuẩn giữ nguyên ở thời điểm hàm hiệu chuẩn được sử dụng về sau. Nếu không, sẽ cần một hiệu chuẩn mới hoặc thực hiện việc điều chỉnh thích hợp để tính đến thay đổi bất kỳ như độ trôi có thể xảy ra (và độ không đảm bảo kèm theo bất kỳ cũng được xử lý). Biểu đồ kiểm soát có thể hữu ích cho mục đích này.

5.8 Xác định đường thẳng bình phương tối thiểu thông thường khớp nhất với dữ liệu

5.8.1 Đường thẳng bình phương tối thiểu thông thường (không trọng số) khớp nhất với dữ liệu được xác định bằng các giá trị a và b của tham số A và B tối thiểu hóa

$$\sum_{i=1}^{m}(y_i - A - Bx_i)^2 \qquad (2)$$

Các giá trị này thỏa mãn công thức đã cho bằng cách cho đạo hàm riêng bậc một của biểu thức (2) đối với A và B bằng 0.

5.8.2 Có thể tính a và b theo các bước sau đây:

1 Đặt $x_0 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} x_i$ và $y_0 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_i$;

2 Đặt $\tilde{x}_i = x_i - x_0$ và $\tilde{y}_i = y_i - y_0$, $i = 1,\ldots, m$;

3 Đặt $b = \frac{\sum_{i=1}^{m} \tilde{x}_i \tilde{y}_i}{\sum_{i=1}^{m} \tilde{x}_i^2}$ và $a = y_0 - bx_0$.

5.8.3 Giá trị x_0 và y_0 sao cho đường khớp nhất với các điểm dữ liệu chuyển đổi $(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)$ đi qua gốc và có cùng độ dốc như với đường khớp nhất với các điểm dữ liệu gốc (x_i, y_i).

CHÚ THÍCH: Về mặt toán học, các tham số khớp nhất được xác định bằng cách giải cặp phương trình tuyến tính liên quan đến ma trận kích thước 2 x 2. Đối với các điểm dữ liệu chuyển đổi, ma trận này là đường chéo, cho phép dễ dàng xác định các tham số nghiệm. Chuyển đổi dữ liệu cũng có tác dụng hữu ích về độ chính xác số học của giải pháp tính toán [4, trang 33].

5.8.4 Các phương pháp mô tả trong Điều 6 đến Điều 10 dưới dây tạo thành phần mở rộng của các các tính toán trong 5.8.2 có tính đến thông tin về độ không đảm bảo quy định.

6 Mô hình dùng cho độ không đảm bảo gắn với y_i

6.1 Khái quát

6.1.1 Điều này xem xét trường hợp 5.3.2 a), tức là khi thông tin dưới đây được cung cấp cho $i = 1,\ldots, m$:

a) dữ liệu đo (x_i, y_i), và

b) độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với y_i.

Phụ lục D cung cấp hướng dẫn về việc thu được các độ không đảm bảo này. Tất cả các độ không đảm bảo và hiệp phương sai khác gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể.

6.1.2 Trường hợp 5.3.2 a) tương ứng với mô tả bởi mô hình thống kê

$$y_i = A^* + B^*x_i + e_i, \qquad i = 1,\ldots, m, \qquad (3)$$

trong đó e_i là thể hiện của các biến ngẫu nhiên độc lập với kỳ vọng 0 và phương sai $u^2(y_i)$ [9, trang 1]. A^* và B^* là các giá trị (chưa biết) của tham số hàm hiệu chuẩn cho hệ thống đo yêu cầu hiệu chuẩn và cung cấp dữ liệu đo. Mô hình này được gọi là mô hình hàm, không có độ không đảm bảo gắn với x_i.

6.1.3 Lấy $w_i = 1/u(y_i)$, $i = 1,\ldots, m$. Các ước lượng a và b là giá trị tối thiểu hóa tổng các bình phương có trọng số

$$\sum_{i=1}^{m} R_i^2 = \sum_{i=1}^{m} w_i^2 (y_i - A - Bx_i)^2 \tag{4}$$

đối với A và B. Vấn đề tối thiểu hóa này được gọi là vấn đề bình phương tối thiểu có trọng số (WLS). Các ước lượng này thỏa mãn công thức đã cho bằng cách gán các đạo hàm riêng bậc một của biểu thức (4) đối với A và B bằng 0.

6.2 Các ước lượng tham số hiệu chuẩn, độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai kèm theo

6.2.1 Các ước lượng a và b được tính ở các bước từ 1 đến 5; độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$ còn hiệp phương sai cov(a, b) được đánh giá ở bước 6:

1 Đặt $w_i = \dfrac{1}{u(y_i)}$, $i = 1,\ldots, m$, và $F^2 = \sum_{i=1}^{m} w_i^2$;

2 Đặt $g_0 = \dfrac{1}{F^2}\sum_{i=1}^{m} w_i^2 x_i$ và $h_0 = \dfrac{1}{F^2} = \sum_{i=1}^{m} w_i^2 y_i$;

3 Đặt $g_i = w_i(x_i - g_0)$ và $h_i = w_i(y_i - h_0)$, $i = 1,\ldots, m$;

4 Đặt $G^2 = \sum_{i=1}^{m} g_i^2$;

5 Đặt $b = \dfrac{1}{G^2}\sum_{i=1}^{m} g_i h_i$ và $a = h_0 - bg_0$;

6 Đặt $u^2(a) = \dfrac{1}{F^2} + \dfrac{g_0^2}{G^2}$, $u^2(b) = \dfrac{1}{G^2}$ và $\mathrm{cov}(a,b) = -\dfrac{g_0}{G^2}$

CHÚ THÍCH 1: Các bước 1 đến 5 tương ứng với các bước:

i) Đặt $w_i = \dfrac{1}{u(y_i)}$, $i = 1,\ldots, m$, $x_0 = \dfrac{\sum_{i=1}^{m} w_i^2 x_i}{\sum_{i=1}^{m} w_i^2}$ và $y_0 = \dfrac{\sum_{i=1}^{m} w_i^2 y_i}{\sum_{i=1}^{m} w_i^2}$;

ii) Đặt $\tilde{x}_i = x_i - x_0$ và $\tilde{y}_i = y_i - y_0$, $i = 1,\ldots, m$;

iii) Đặt $b = \dfrac{\sum_{i=1}^{m} w_i^2 \tilde{x}_i \tilde{y}_i}{\sum_{i=1}^{m} w_i^2 \tilde{x}_i}$ và $a = y_0 - bx_0$.

CHÚ THÍCH 2: Các bước từ 1 đến 5 xác định phép tính bình phương tối thiểu cho hệ thống các công thức

$$w_i a + w_i x_i b = w_i y_i,\ i = 1,\ldots, m \ .$$

CHÚ THÍCH 3: Nếu $u(y_i)$ giống nhau, sao cho w_i giống nhau, thì a và b giống với giá trị cho bởi đường bình phương tối thiểu thông thường khớp nhất trong 5.8.2.

CHÚ THÍCH 4: $u^2(a)$, $u^2(b)$và cov(a,b) trong bước 6 thu được bằng cách áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008) cho a và b như được cung cấp bởi bước 1 đến 5.

6.2.2 Các ước lượng a và b xác định trong 6.1.3 có các tính chất sau đây [15] đối với dữ liệu y_i theo mô hình (3):

i) Các ước lượng a và b được cho bởi tổ hợp tuyến tính các dữ liệu y_i.

ii) Các ước lượng a và b được coi là các thể hiện của biến ngẫu nhiên có kỳ vọng tương ứng là A^* và B^*.

iii) Ma trận hiệp phương sai đối với biến ngẫu nhiên trong ii) được quy định là $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b) tính được trong 6.2.1.

Tính chất i) nêu rõ a và b được rút ra bằng cách sử dụng phương pháp ước lượng tuyến tính. Tính chất ii) nêu rõ rằng phương pháp ước lượng tuyến tính là không chệch. Tính chất ii) và iii) cùng cho thấy rằng phương pháp ước lượng là nhất quán theo nghĩa khi số lượng m điểm dữ liệu tăng lên, thì ước lượng a và b hội tụ A^* và B^*, tương ứng.

Phương pháp ước lượng của 6.1.3 có tính chất tối ưu sau đây đối với dữ liệu y_i theo mô hình (3):

iv) Các ước lượng $\breve{a}$ và $\breve{b}$ cung cấp bởi phương pháp ước lượng tuyến tính không chệch bất kỳ có thể được coi là các thể hiện của biến ngẫu nhiên có phương sai ít nhất là lớn bằng phương sai gắn với phương pháp ước lượng WLS.

Tính chất iv) có thể được giải thích như dưới đây. Đối với hằng số c và d, độ không đảm bảo chuẩn $u(c\breve{a} + d\breve{b})$ gắn với tổ hợp tuyến tính các ước lượng $\breve{a}$ và $\breve{b}$ cung cấp bởi phương pháp ước lượng tuyến tính không chệch bất kỳ ít nhất là lớn bằng $u(ca + db)$. Các tính chất từ i) đến iv) chứng tỏ việc sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu cho dữ liệu tương thích với mô hình (3). Lưu ý là khi sử dụng mô hình này, các tuyên bố chỉ được đưa ra về kỳ vọng và phương sai gắn với e_i; các phân bố kèm theo không được quy định thêm. Nếu đưa ra giả định bổ sung rằng e_i là thể hiện của biến ngẫu nhiên phân bố chuẩn thì khi đó các tính chất khác gắn với phương pháp ước lượng WLS có thể đưa ra:

v) Các biến ngẫu nhiên trong ii) được đặc trưng bởi phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở A^* và B^* với ma trận hiệp phương sai quy định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b).

vi) Các ước lượng a và b là các ước lượng hợp lý lớn nhất, tương ứng với giá trị hợp lý nhất của A và B có thể làm tăng dữ liệu đo quan trắc được y_i.

vii) Trong bối cảnh suy luận Bayes, phân bố trong phạm vi kiến thức cho A và B, đã cho dữ liệu đo quan trắc y_i, là phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở a và b với ma trận hiệp phương sai xác định bởi $u^2(a)$ và $u^2(b)$ và cov(a,b).

6.3 Xác nhận giá trị sử dụng của mô hình

Nếu $m > 2$ thì giá trị sử dụng của mô hình có thể kiểm nghiệm một phần bằng cách sử dụng phần dư có trọng số r_i (tiếp theo 6.2.1):

7 Thiết lập $r_i = w_i(y_i - a - bx_i)$, $i = 1,\ldots, m$;

8 Thiết lập giá trị Khi-bình phương quan trắc $\chi^2_{obs} = \sum_{i=1}^{m} r_i^2$ và bậc tự do $\nu = m - 2$;

9 Kiểm tra xem χ^2_{obs} có vượt quá phân vị 95 % của χ^2_ν không, và xem liệu có bác bỏ mô hình đường thẳng hay không.

CHÚ THÍCH: Kiểm nghiệm Khi-bình phương dựa trên giả định là e_i trong mô hình (3) là các thể hiện của biến ngẫu nhiên chuẩn độc lập.

6.4 Tổ chức các tính toán

Các tính toán trong 6.2.1 và 6.3 có thể được tổ chức thành một hoặc hai bảng để thực hiện trong bảng tính như trong Bảng 2 và Bảng 3, có thể hợp nhất thành một bảng hoặc bảng tính.

Bảng 2 – Dữ liệu cho hàm hiệu chuẩn đường thẳng bằng bình phương tối thiểu có trọng số

x_1	y_1	$u(y_1)$
x_2	y_2	$u(y_2)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_m	y_m	$u(y_m)$

Bảng 3 – Tổ chức tính toán để xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng bằng bình phương tối thiểu có trọng số

				6.2.1 bước 2,3				6.2.1 bước 5 6.3 bước 7	6.3 bước 8
				g_0	h_0			a	
w_1	w_1^2	$w_1^2x_1$	$w_1^2y_1$	g_1	h_1	g_1^2	g_1h_1	r_1	r_1^2
w_2	w_2^2	$w_2^2x_2$	$w_2^2y_2$	g_2	h_2	g_2^2	g_2h_2	r_2	r_2^2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
w_m	w_m^2	$w_m^2x_m$	$w_m^2y_m$	g_m	h_m	g_m^2	g_mh_m	r_m	r_m^2
	$F^2 = \sum w_i^2$	$\sum w_i^2x_i$	$\sum w_i^2y_i$			$G^2 = \sum g_i^2$	$\sum g_ih_i$	b	$\chi^2_{obs} = \sum r_i^2$

VÍ DỤ: (TRỌNG SỐ BẰNG NHAU) Bảng 4 đưa ra sáu điểm dữ liệu và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo. Giá trị đo được x_i được lấy là chính xác và độ không đảm bảo chuẩn gắn với giá trị đo được y_i là $u(y_i) = 0,5$. Do đó, trọng số được lấy là $w_i = 1/u(y_i) = 2,0$, $i = 1,\ldots,6$.

Bảng 4 – Dữ liệu thể hiện sáu điểm đo, trọng số bằng nhau

x_i	y_i	$u(y_i)$
1,0	3,3	0,5
2,0	5,6	0,5
3,0	7,1	0,5
4,0	9,3	0,5
5,0	10,7	0,5
6,0	12,1	0,5

Tham số đường thẳng khớp nhất được tính như trong Bảng 5. Từ bảng này, g_0 = 84,000/24,000 = 3,500, h_0 = 192,400/24,000 = 8,017, b = 123,000/70,000 = 1,757 và a = 8,017 – (1,757)(3,500) = 1,867.

Bảng 5 – Bảng tính toán gắn với dữ liệu trong Bảng 4

w_i	w_i^2	$w_i^2 x_i$	$w_i^2 y_i$	g_i	h_i	g_i^2	$g_i h_i$	r_i	r_i^2
				3.500	8.017			a = 1.867	
2.000	4.000	4.000	13.200	−5.000	−9.433	25.000	47.167	−0.648	0.419
2.000	4.000	8.000	22.400	−3.000	−4.833	9.000	14.500	0.438	0.192
2.000	4.000	12.000	28.400	−1.000	−1.833	1.000	1.833	−0.076	0.006
2.000	4.000	16.000	37.200	1.000	2.567	1.000	2.567	0.810	0.655
2.000	4.000	20.000	42.800	3.000	5.367	9.000	16.100	0.095	0.009
2.000	4.000	24.000	48.400	5.000	8.167	25.000	40.833	−0.619	0.383
	24.000	84.000	192.400			70.000	123.000	b = 1.757	1.665

Độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai gắn với tham số được làm khớp cũng có thể được đánh giá, sử dụng công thức trong 6.2.1, từ thông tin trong Bảng 5:

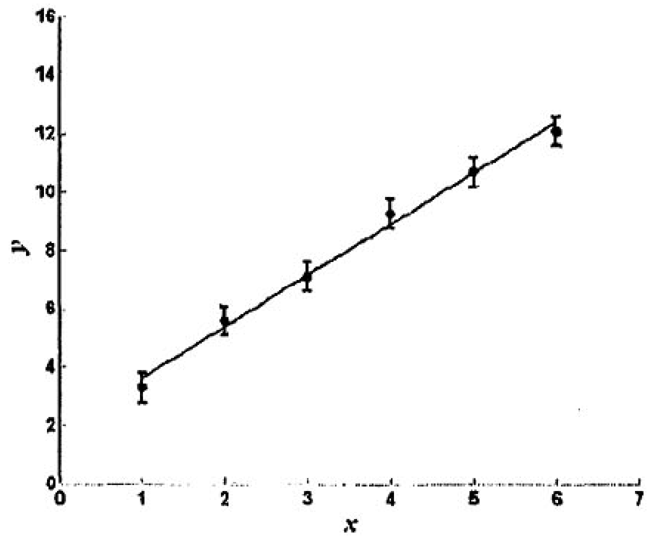
$u^2(a)$ = 1/24,000 +(3,500)²/70,000, như vậy $u(a)$ = 0,465;

$u^2(b)$ = 1/70,000, như vậy $u(b)$ = 0,120;

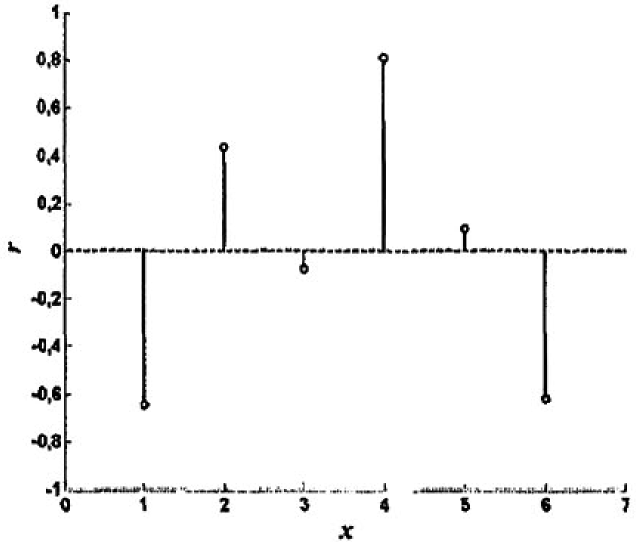
$u(a, b)$ = –3,500/70,000 = –0,050.

Giá trị Khi-bình phương quan trắc được là χ^2_{obs} = 1,665 với ν = 4 bậc tự do, như tính được ở Bảng 5 sử dụng 6.3. Vì χ^2_{obs} không vượt quá phân vị 95 % của χ^2_ν, tức là 9,488, nên không có lý do để nghi ngờ sự nhất quán của mô hình đường thẳng và dữ liệu.

Dữ liệu và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp được trình bày trên Hình 2. Độ không đảm bảo chuẩn gắn với y_i được minh họa (và trong các hình tiếp sau) bằng đường thẳng đứng, tập trung vào y_i và có các cực trị $y_i - u(y_i)$ và $y_i + u(y_i)$. Phần dư có trọng số được trình bày trên Hình 3.



Hình 2 – Dữ liệu trong Bảng 4 và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp thu được trong Bảng 5



Hình 3 – Phần dư có trọng số r_i thu được trong Bảng 5

VÍ DỤ: (TRỌNG SỐ KHÔNG BẰNG NHAU) Bảng 6 đưa ra sáu điểm dữ liệu và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo. Giá trị đo được x_i được lấy là chính xác. y_i thu được bằng cách sử dụng hai thiết lập phương tiện, sao cho giá trị X càng lớn thì y_i càng kém chính xác.

Bảng 6 – Dữ liệu thể hiện sáu điểm đo, trọng số không bằng nhau

x_i	y_i	$u(y_i)$
1,0	3,2	0,5
2,0	4,3	0,5
3,0	7,6	0,5
4,0	8,6	1,0
5,0	11,7	1,0
6,0	12,8	1,0

Tham số đường thẳng khớp nhất được tính như trong Bảng 7. Từ bảng này, g_0 = 39,000/15,000 = 2,600, h_0 = 93,500/15,000 = 6,233, b = 65,000/31,600 = 2,057 và a = 6,233 – (2,057)(2,600) = 0,885.

Bảng 7 – Bảng tính toán gắn với dữ liệu trong Bảng 6

w_i	w_i^2	$w_i^2 x_i$	$w_i^2 y_i$	g_i	h_i	g_i^2	$g_i h_i$	r_i	r_i^2
				2.600	6.233			a = 0,885	
2,000	4.000	4.000	12.800	−3.200	−0.067	10,240	19,413	0,516	0,266
2,000	4.000	8.000	17.200	−1.200	−3.867	1,440	4.640	−1,398	1.955
2,000	4.000	12.000	30.400	0.800	2.733	0.640	2.187	1,088	1.183
1,000	1.000	4,000	8,600	1.400	2.367	1,960	3.313	−0,513	0.263
1,000	1.000	5,000	11.700	2.400	5,467	5,760	13.120	0,530	0,281
1.000	1.000	6,000	12.800	3.400	6.567	11.560	22.327	−0,427	0.182
	15.000	39,000	93.500			31,600	65,000	b = 2,057	4.131

Độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai gắn với tham số được làm khớp cũng có thể được đánh giá, sử dụng công thức trong 6.2.1, từ thông tin trong Bảng 7:

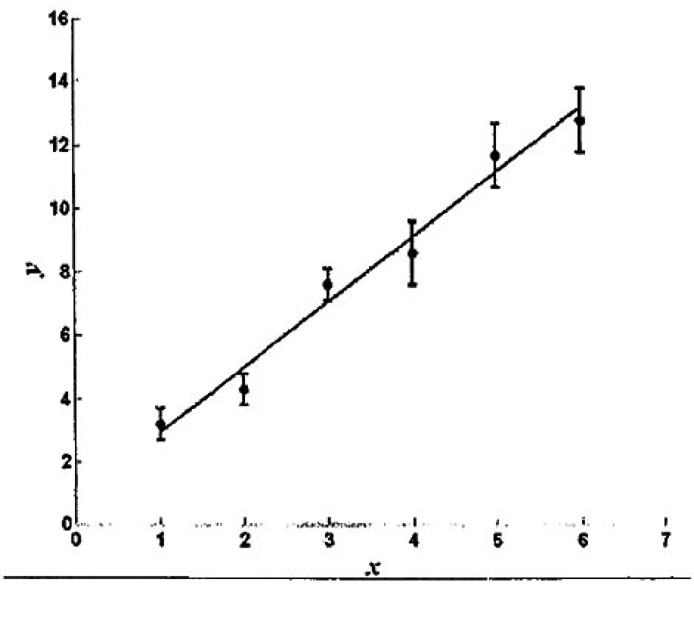
$u^2(a)$ = 1/15,000 +(2,600)²/31,600, như vậy $u(a)$ = 0,530;

$u^2(b)$ = 1/31,600, như vậy $u(b)$ = 0,178;

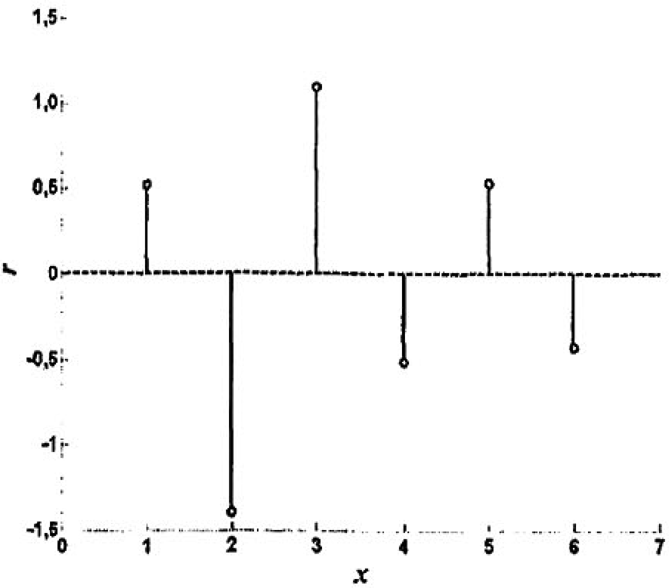
$u(a, b)$ = −2,600/31,600 = −0,082.

Giá trị Khi-bình phương quan trắc được là χ^2_{obs} = 4,131 với ν = 4 bậc tự do, như tính được ở Bảng 7 sử dụng 6.3. Vì χ^2_{obs} không vượt quá phân vị 95 % của χ^2_ν, tức là 9,488, nên không có lý do để nghi ngờ sự nhất quán của mô hình đường thẳng và dữ liệu.

Dữ liệu và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp được trình bày trên Hình 4. Phần dư có trọng số được trình bày trên Hình 5.



Hình 4 – Dữ liệu trong Bảng 6 và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp thu được trong Bảng 7



Hình 5 – Phần dư có trọng số r_i thu được trong Bảng 7

7 Mô hình độ không đảm bảo gắn với x_i và y_i

7.1 Khái quát

7.1.1 Điều này xem xét trường hợp 5.3.2 b), tức là khi thông tin dưới đây được cung cấp cho $i = 1,\ldots, m$:

a) dữ liệu đo (x_i, y_i),

b) độ không đảm bảo chuẩn $u(x_i)$ gắn với x_i, và

b) độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với y_i.

Phụ lục D cung cấp hướng dẫn về việc thu được các độ không đảm bảo này. Tất cả các hiệp phương sai khác gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể.

7.1.2 Trường hợp 5.3.2 b) tương ứng với mô tả bởi mô hình thống kê

$$x_i = X_i^* + d_i, \qquad y_i = Y_i^* + e_i, \qquad Y_i^* = A^* + B^* X_i^* \qquad i = 1,\ldots, m, \tag{5}$$

trong đó d_i và e_i là thể hiện của các biến ngẫu nhiên độc lập với kỳ vọng 0 và phương sai tương ứng là $u^2(x_i)$ và $u^2(y_i)$. Mô hình này được gọi là mô hình hàm số. Trong mô hình, (x_i, y_i) đại diện cho tọa độ đo được của điểm (không quan trắc được) (X_i^*, Y_i^*) nằm trên đường $Y_i^* = A^* + B^*X$.

7.1.3 Vì x_i (cùng với y_i – xem Điều 6) có độ không đảm bảo kèm theo nên cũng phải tính đến chúng khi xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng. Vấn đề xác định a và b trong bối cảnh này là một trong hồi quy khoảng cách trực giao có trọng số (ODR có trọng số) hoặc hồi quy khoảng cách tổng quát hóa (GDR) [2]. Trong tài liệu thống kê nó được gọi là mô hình sai số-trong-biến [7], [9, trang 50], [17, trang 189]. Các ước lượng a và b là ước lượng tối thiểu hóa tổng các bình phương

$$\sum_{i=1}^{m}\left[v_i^2(x_i - X_i)^2 + w_i^2(y_i - A - BX_i)^2\right] \quad , \tag{6}$$

đối với A, B và X_i, $i = 1, \ldots, m$, các trọng số $v_i = 1/u(x_i)$ và $w_i = 1/u(y_i)$. Mỗi ước lượng giải x_i^*, cùng với a và b, xác định ước lượng (x_i^*, y_i^*), $y_i^* = a + bx_i^*$, của (X_i^*, Y_i^*) trong mô hình (5).

7.1.4 Cho trước A và B, các giá trị x_i^* tối thiểu hóa tổng các bình phương (6) đối với X_i được cho bởi

$$x_i^* = x_i^*(A,B) = \left[u^2(y_i)x_i + (y_i - A)Bu^2(x_i)\right]T_i; \qquad T_i = \frac{1}{u^2(y_i) + B^2u^2(x_i)}. \tag{7}$$

Sử dụng biểu thức (7) vấn đề tối ưu hóa có thể được đặt ra đối với tham số A và B độc lập bằng cách thay thế X_i trong biểu thức (6) bằng $x_i^*(A,B)$, có

$$\sum_{i=1}^{m}\left\{v_i^2\left[x_i - x_i^*(A,B)\right]^2 + w_i^2\left[y_i - y_i^*(A,B)\right]^2\right\},\ y_i^*(A,B) = A + Bx_i^*(A,B). \tag{8}$$

7.1.5 Nếu

$$R_i = R_i(A,B) = \left\{-B\left[x_i - x_i^*(A,B)\right] + \left[y_i - y_i^*(A,B)\right]\right\}T_i^{1/2}, \tag{9}$$

thì tổng các bình phương (8) tương đương với

$$\sum_{i=1}^{m} R_i^2$$

Số hạng R_i có giải thích hình học dưới đây. Véc tơ vuông góc với đường thẳng $Y = A + BX$ được cho bởi $(-B,1)^T / (1 + B^2)^{1/2}$ và R_i là bội số trọng số của thành phần có dấu của $(x_i - x_i^*(A,B),\ y_i - y_i^*(A,B))^T$ theo chiều của véc tơ vuông góc.

CHÚ THÍCH 1: Bình phương tối thiểu thông thường (xem 5.8) và bình phương tối thiểu có trọng số (xem Điều 6), khoảng cách tới đường thẳng được đo 'theo chiều thẳng đứng', tức là, theo chiều Y, phản ánh thực tế là độ lệch của điểm đo được (x_i, y_i) so với đường thẳng có thể được tính về số hạng sai số e_i kèm theo y_i, vì x_i được giả định là đã biết chính xác. ODR có trọng số giải quyết trường hợp trong đó còn có độ không đảm bảo gắn với x_i.

CHÚ THÍCH 2: Biểu thức (7) được cho bằng cách cho đạo hàm riêng bậc một của biểu thức (6) đối với A, B và X_i bằng 0.

CHÚ THÍCH 3: Nếu $u_i(x_i) = 0$ thì khi đó trong biểu thức (7) $x_i^*(A,B) = x_i$ (như vậy $y_i^*(A,B) = A + Bx_i$) và $T_i = 1/u^2(y_i) = w_i^2$. Kết quả là R_i trong biểu thức (9) được cho bởi $R_i = w_i(y_i - A - Bx_i)$. Do đó, nếu $u(x_i) = 0$ thì số hạng R_i được đánh giá theo cách tương tự như trong biểu thức (4) ở 6.1.3.

CHÚ THÍCH 4: Nếu $u(x_i) = u(y_i) = u_i$ thì khi đó $x_i^*(A,B)$ xác định điểm trên đường thẳng $Y = A + BX$ gần nhất với (x_i, y_i) và

$$T_i = \frac{1}{u_i^2}\frac{1}{1+B^2},\ R_i = \frac{1}{u_i}\frac{1}{(1+B^2)^{1/2}}\left\{-B\left[x_i - x_i^*(A,B)\right] + \left[y_i - y_i^*(A,B)\right]\right\}.$$

Vì véc tơ vuông góc với đường thẳng là $(-B,1)^T / (1 + B^2)^{1/2}$, nên R_i là khoảng cách có trọng số tính từ điểm (x_i, y_i) tới đường thẳng $Y = A + BX$.

7.1.6 Điều 7.1.3 liên quan đến A, B và X_i, $i = 1,\ldots, m$, như các biến trong tối thiểu hóa. Các tính toán nêu trong 7.2.1 thực hiện quá trình tối thiểu hóa này trong phép lặp hai giai đoạn [2]:

i) từ các gần đúng với a và b, xác định tối ưu x_i^* tương ứng, và

ii) đối với các x_i^* này, xác định các gần đúng mới với a và b sẽ làm giảm tổng các bình phương (6).

CHÚ THÍCH: Không có phân biệt nào về ký hiệu giữa x_i^* ở phép lặp điển hình và giá trị tính được cuối cùng.

7.2 Ước lượng tham số hiệu chuẩn và độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai kèm theo

7.2.1 Các ước lượng a và b được tính ở các bước từ 1 đến 6 dưới đây sử dụng quy trình lặp chỉ ra ở 7.1.6; độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$, $u(b)$ và hiệp phương sai $\mathrm{cov}(a,b)$ được đánh giá ở bước 7 (xem Phụ lục B):

1 Thu được các xấp xỉ ban đầu $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ cho a và b, ví dụ, bằng cách xác định đường khớp nhất bình phương tối thiểu có trọng số với dữ liệu (xem 6.2.1 bước 1 đến 5), bỏ qua độ không đảm bảo gắn với x_i;

2 Đặt $t_i = \dfrac{1}{u^2(y_i) + \tilde{b}^2 u^2(x_i)}$, $x_i^* = \left[x_i u^2(y_i) + (y_i - \tilde{a})\tilde{b} u^2(x_i)\right] t_i$ và $z_i = y_i - \tilde{a} - \tilde{b} x_i$, $i = 1,\ldots, m$;

3 Đặt $f_i = t_i^{1/2}$, $g_i = f_i x_i^*$ và $h_i = f_i z_i$, $i = 1,\ldots, m$;

4 Xác định giải pháp bình phương tối thiểu (không có trọng số) δa và δb cho hệ thức

$$(\delta A) f_i + (\delta B) g_i = h_i, \qquad i = 1,\ldots, m,$$

đó là

i) Đặt $F^2 = \sum_{i=1}^{m} f_i^2$;

ii) Đặt $g_0 = \frac{1}{F^2}\sum_{i=1}^{m} f_i g_i$ và $h_0 = \frac{1}{F^2}\sum_{i=1}^{m} f_i h_i$;

iii) Đặt $\tilde{g}_i = g_i - g_0 f_i$ và $\tilde{h}_i = h_i - h_0 f_i$, $i = 1,\ldots, m$;

iv) Đặt $\tilde{G}^2 = \sum_{i=1}^{m} \tilde{g}_i^2$;

v) Đặt $\delta b = \frac{1}{\tilde{G}^2} = \sum_{i=1}^{m} \tilde{g}_i \tilde{h}_i$ và $\delta a = h_0 - (\delta b) g_0$;

5 Cập nhật các xấp xỉ hiện tại cho các tham số và phần dư: $\tilde{a} := \tilde{a} + \delta a$, $\tilde{b} := \tilde{b} + \delta b$, $r_i = \tilde{h}_i - (\delta b)\tilde{g}_i$, $i = 1,\ldots, m$

6 Lặp lại các bước từ 2 đến 5 cho đến khi đạt được sự hội tụ. Đặt $a = \tilde{a}$, $b = \tilde{b}$;

7 Đặt $u^2(a) = \dfrac{1}{F^2} + \dfrac{g_0^2}{\tilde{G}^2}$, $u^2(b) = \dfrac{1}{\tilde{G}^2}$ và $\mathrm{cov}(a,b) = -\dfrac{g_0}{\tilde{G}^2}$; trong đó g_0, h_0, ...là các giá trị tính được ở bước 4.

CHÚ THÍCH 1: Các tính toán ở bước 4 tương tự như các tính toán ở bước 1 đến 5 trong 6.2.1.

CHÚ THÍCH 2: Ở bước 2, x_i^* xác định điểm $(x_i^*, a + bx_i^*)$ trên xấp xỉ hiện tại với hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp nhất là gần nhất, như khoảng cách có trọng số, với điểm dữ liệu đo được (x_i, y_i).

CHÚ THÍCH 3: Ở bước 3, h_i tính được đại diện cho giá trị của khoảng cách tổng quát hóa R_i trong biểu thức (9) từ điểm dữ liệu thứ i đến ước lượng hiện tại của hàm hiệu chuẩn đường thẳng. Thuật toán được thiết kế để tối thiểu hóa tổng các bình phương của các khoảng cách này.

CHÚ THÍCH 4: Ở bước 4, các hiệu chính δa và δb thường sẽ giảm độ lớn bằng hệ số hằng số gần đúng giữa các phép lặp. Mức độ giảm phụ thuộc chủ yếu vào độ không đảm bảo gắn với dữ liệu: độ không đảm bảo càng nhỏ thì mức giảm sẽ càng nhiều. Quy trình lặp có thể kết thúc khi độ lớn của các hiệu chính được điều chỉnh đến mức không đáng kể.

CHÚ THÍCH 5: Phần dư tính được ở bước 5 được gắn với phép giải hệ thức tính ở bước 4. Tại điểm hội tụ, r_i tính được ở bước 5 bằng h_i tính được ở bước 3.

CHÚ THÍCH 6: Hoàn toàn chỉ yêu cầu các phần dư tính được ở bước 5 trong lần lặp cuối. Tuy nhiên, để dễ trình bày dạng bảng (Bảng 9 ở 7.4), phần dư được tính tại mỗi lần lặp.

CHÚ THÍCH 7: $u^2(a)$, $u^2(b)$ và $\mathrm{cov}(a,b)$ trong bước 7 thu được bằng cách áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008) cho a và b như được cung cấp bởi các bước 1 đến 6.

7.2.2 Trong khi có thể rút ra các tính chất trong 6.2.2 đối với phương pháp ước lượng WLS thì thực tế là các ước lượng a và b xác định bằng cách tối thiểu hóa tổng các bình phương (6) phụ thuộc phi tuyến vào dữ liệu x_i và y_i nghĩa là không thể dễ dàng nêu rõ các tính chất tương ứng đối với ODR có trọng số. Các ước lượng a và b xác định trong 7.1.3 có các tính chất sau đây đối với dữ liệu x_i và y_i theo mô hình (5):

i) Các ước lượng a và b được cho bởi hàm phi tuyến của các dữ liệu x_i và y_i.

ii) Các ước lượng a và b được coi là các thể hiện của biến ngẫu nhiên có kỳ vọng tương ứng là A^* và B^* gần đúng.

iii) Các thành phần của ma trận hiệp phương sai đối với biến ngẫu nhiên trong ii) xấp xỉ bằng $u^2(a)$, $u^2(b)$ và $\mathrm{cov}(a,b)$ tính được trong 7.2.1.

Các gần đúng trong ii) và iii) sẽ chính xác hơn đối với dữ liệu có độ không đảm bảo kèm theo nhỏ hơn. Tuy nhiên, phương pháp ước lượng có tính chất nhất quán sau đây:

iv) Đối với dữ liệu thỏa mãn mô hình (5), khi số lượng m điểm dữ liệu tăng, các ước lượng a và b hội tụ đến A^* và B^*, tương ứng [16].

Ngược lại, phương pháp ước lượng WLS thường sẽ ước lượng thấp độ lớn của tham số độ dốc [5] đối với dữ liệu tạo ra theo mô hình (5).

Nếu giả định bổ sung được đưa ra là d_i và e_i là các thể hiện của biến ngẫu nhiên phân bố chuẩn thì các tính chất khác gắn với phương pháp ước lượng ODR có trọng số có thể được nêu ra:

v) Các biến ngẫu nhiên trong ii) được đặc trưng gần đúng bởi phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở A^* và B^* với ma trận hiệp phương sai quy định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b).

vi) Các ước lượng a và b là ước lượng hợp lý lớn nhất, tương ứng với giá trị hợp lý nhất của A và B có thể làm tăng dữ liệu đo quan trắc được x_i và y_i.

vii) Trong bối cảnh suy luận Bayes, phân bố trong phạm vi kiến thức cho A và B, đã cho dữ liệu đo quan trắc x_i và y_i, là xấp xỉ phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở a và b với ma trận hiệp phương sai xác định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b).

7.3 Xác nhận giá trị sử dụng của mô hình

Nếu $m > 2$ thì giá trị sử dụng của mô hình có thể kiểm nghiệm một phần bằng cách sử dụng phần dư r_i có trọng số tính được trong bước 5 ở 7.2.1 ở lần lặp cuối cùng, tức là sự hội tụ (tiếp tục từ 7.2.1):

8 Thiết lập giá trị Khi-bình phương quan trắc $\chi^2_{obs} = \sum_{i=1}^{m} r_i^2$ và bậc tự do $v = m - 2$;

9 Kiểm tra xem χ^2_{obs} có vượt quá phân vị 95 % của χ^2_v không, và xem liệu có bác bỏ mô hình đường thẳng hay không.

CHÚ THÍCH: Kiểm nghiệm Khi-bình phương dựa trên giả định là d_i và e_i trong mô hình (5) là các thể hiện của biến ngẫu nhiên chuẩn độc lập và phép gần đúng bậc một.

7.4 Tổ chức tính toán

Các tính toán trong 7.2.1 và 7.3 có thể được tổ chức thành hai bảng liên tiếp, phù hợp để thực hiện trong bảng tính. Bảng thứ nhất (Bảng 8), đưa ra các xấp xỉ $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ (xem 7.2.1 bước 1), tính f_i, g_i và h_i (xem 7.2.1 bước 3). Bảng thứ hai (Bảng 9) sử dụng các giá trị f_i, g_i và h_i này để tính các hiệu chính δa và δb (xem 7.2.1 bước 4).

Bảng 8 – Tính toán để xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng, đã cho các xấp xỉ $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ với các ước lượng tham số đường thẳng a và b

7.2.1 bước 1 hoặc bước 5 7.2.1 bước 2 7.2.1 bước 3
7.2.1 bước 2

				$\tilde{a}$	$\tilde{b}$			a	
x_1	$u(x_1)$	y_1	$u(y_1)$	t_1	x_1^*	z_1	f_1	g_1	h_1
x_2	$u(x_2)$	y_2	$u(y_2)$	t_2	x_2^*	z_2	f_2	g_2	h_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_m	$u(x_m)$	y_m	$u(y_m)$	t_m	x_m^*	z_m	f_m	g_m	h_m

Bảng 9 – Tổ chức tính toán để xác định các hiệu chính δa và δb cho hàm hiệu chuẩn đường thẳng GDR

7.2.1các bước 7.2.24 ii), 4 iii) 7.2.1 các bước 4 v), 5 7.3 bước 8

			g_0	h_0			δa	
f_1^2	f_1g_1	f_1h_1	$\tilde{g}_1$	$\tilde{h}_1$	$\tilde{g}_1^2$	$\tilde{g}_1\tilde{h}_1$	r_1	r_1^2
f_2^2	f_2g_2	f_2h_2	$\tilde{g}_2$	$\tilde{h}_2$	$\tilde{g}_2^2$	$\tilde{g}_2\tilde{h}_2$	r_2	r_2^2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
f_m^2	f_mg_m	f_mh_m	$\tilde{g}_m$	$\tilde{h}_m$	$\tilde{g}_m^2$	$\tilde{g}_m\tilde{h}_m$	r_m	r_m^2
$F^2 = \sum f_i^2$	$\sum f_ig_i$	$\sum f_i h_i$			$\tilde{G}^2 = \sum \tilde{g}_i^2$	$\sum \tilde{g}_i \tilde{h}_i$	δb	$\sum r_i^2$

VÍ DỤ: Bảng 10 đưa ra sáu điểm dữ liệu đo được và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo.

Bảng 10 – Sáu điểm dữ liệu đo được và độ không đảm bảo chuẩn tương ứng

x_i	$u(x_i)$	y_i	$u(y_i)$
1,2	0,2	3,4	0,2
1,9	0,2	4,4	0,2
2,9	0,2	7,2	0,4
4,0	0,2	8,5	0,4
4,7	0,2	10,8	0,4
5,9	0,2	13,5	0,4

Để xác định các xấp xỉ $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ ban đầu (7.2.1 bước 1), hàm hiệu chuẩn đường thẳng bình phương tối thiểu có trọng số được xác định. Tiếp theo quy trình mô tả trong 6.2, thu được các dữ liệu cho trong Bảng 11 và Bảng 12.

Bảng 11 – Dữ liệu đại diện cho sáu điểm đo

x_i	y_i	$u(y_i)$
1,2	3,4	0,2
1,9	4,4	0,2
2,9	7,2	0,4
4,0	8,5	0,4
4,7	10,8	0,4
5,9	13,5	0,4

Bảng 12 – Bảng tính toán gắn với dữ liệu trong Bảng 11 để xác định các xấp xỉ $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ ban đầu

w_i	w_i^2	$w_i^2 x_i$	$w_i^2 y_i$	g_i	h_i	g_i^2	$g_i h_i$	r_i	r_i^2
				2.673 3	6.186 7			$a = 0.658\ 3$	
5.000 0	25.000 0	30.000 0	85.000 0	−6.866 7	−13.933 3	47.151 1	95.675 6	0.818 6	0.670 1
5.000 0	25.000 0	47.500 0	110.000 0	−3.366 7	−8.933 3	11.334 4	30.075 6	−1.700 6	2.892 0
5.000 0	25.000 0	72.500 0	180.000 0	1.633 3	5.066 7	2.667 8	8.275 6	1.557 7	2.426 4
2.500 0	6.250 0	25.000 0	53.125 0	3.566 7	5.783 3	12.721 1	20.627 2	−1.879 1	3.531 0
2.500 0	6.250 0	29.375 0	67.500 0	5.316 7	11.533 3	28.266 9	61.318 9	0.111 3	0.012 4
2.500 0	6.250 0	36.875 0	84.375 0	8.316 7	18.283 3	69.166 9	152.056 4	0.416 3	0.173 3
	93.750 0	241.250 0	580.000 0			171.308 3	368.029 2	$b = 2.148\ 3$	9.705 2

Các xấp xỉ ban đầu là $\tilde{a}$ = 0,658 3 và $\tilde{b}$ = 2,148 3. Với các xấp xỉ này, bảng dữ liệu đầu tiên (Bảng 13) có dạng trong Bảng 8 có thể được tính để thu được f_i, g_i và h_i. Bảng dữ liệu thứ hai (Bảng 14) có dạng trong Bảng 9 khi đó tính các số gia δa = –0,078 4 và δb = 0,011 1 (7.2.1 bước 4). Ở cuối phép lặp, các xấp xỉ $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ được cập nhật (7.2.1 bước 5):

$$\tilde{a} := \tilde{a} + \delta a = 0{,}658\ 3 - 0{,}078\ 4 = 0{,}579\ 9;$$

$$\tilde{b} := \tilde{b} + \delta b = 2{,}148\ 3 + 0{,}011\ 1 = 2{,}159\ 4.$$

Với các giá trị $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ cập nhật này, hai dữ liệu bảng mới được hình thành (Bảng 15 và Bảng 16) để xác định thêm các hiệu chính δa = = –0,001 0 và δb = 0,000 2. Quá trình này được lặp lại lần thứ ba (Bảng 17 và Bảng 18). Trong trường hợp này, độ lớn của các hiệu chính nhỏ hơn 0,000 05, được điều chỉnh để thành không đáng kể cho mục đích này, và các xấp xỉ cuối cùng cho ước lượng tham số là a = 0,578 8 và b = 2,159 7.

Độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai (7.2.1 bước 7) gắn với tham số được làm khớp cũng có thể được đánh giá từ thông tin trong bảng cuối cùng (Bảng 18):

$$u^2(a) = 1/21{,}897\ 7 + (3{,}141\ 4)^2/54{,}427\ 1 \text{ như vậy } u(a) = 0{,}476\ 4;$$

$$u^2(b) = 1/54{,}427\ 1, \text{ như vậy } u(b) = 0{,}135\ 5;$$

$$u(a,b) = -3{,}141\ 4/54{,}427\ 1 = -0{,}057\ 7.$$

Giá trị Khi-bình phương quan trắc được là χ^2_{obs} = 2,743 với ν = 4 bậc tự do, như tính được ở Bảng 18 sử dụng 7.3. Vì χ^2_{obs} không vượt quá phân vị 95 % của χ^2_{ν}, tức là 9,488, nên không có lý do để nghi ngờ sự nhất quán của mô hình đường thẳng và dữ liệu.

Các điểm dữ liệu và hàm hiệu chuẩn đường thẳng ODR có trọng số được trình bày bằng đồ thị trên Hình 6. Đối với mỗi giá trị i, đồ thị cũng đưa ra vị trí của (x_i^*, y_i^*), điểm trên đường thẳng gần nhất về mặt xác suất với điểm dữ liệu (x_i, y_i). Phần dư có trọng số được minh họa trên Hình 7.

Bảng 13 – Lần lặp đầu tiên để xác định f_i, g_i và h_i, cho trước $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$

x_i	$u(x_i)$	y_i	$u(y_i)$	t_i	x_i^*	z_i	f_i	g_i	h_i
				0.658 3	2.148 3				
1,200 0	0.200 0	3.400 0	0.200 0	4.452 2	1.262 6	0.163 7	2.110 0	2.664 2	0.345 5
1.900 0	0.200 0	4.400 0	0.200 0	4.452 2	1.769 9	−0.340 1	2.110 0	3.734 5	−0.717 6
2,900 0	0.200 0	7.200 0	0.200 0	4.452 2	3.019 2	0.311 6	2.110 0	6.370 6	0.657 5
4.000 0	0.200 0	8.500 0	0.400 0	2.901 9	3.812 6	−0.751 5	1.703 5	6.494 7	−1.280 2
4.700 0	0.200 0	10.800 0	0.400 0	2.901 9	4.711 1	0.044 7	1.703 5	8.025 3	0.076 1
5.900 0	0,200 0	13.500 0	0.400 0	2.901 9	5.941 6	0.166 7	1.703 5	10.121 4	0.284 0

Bảng 14 – Lần lặp đầu tiên để xác định các hiệu chính δa và δb, cho trước f_i, g_i và h_i

f_i^2	$f_i g_i$	$f_i h_i$	$\tilde{g}_i$	$\tilde{h}_i$	$\tilde{g}_i^2$	$\tilde{g}_i \tilde{h}_i$	r_i	r_i^2
			3.123 9	−0,043 7			$\delta a = -0{,}075\,4$	
4.452 2	5.621 6	0.729 0	−3,927 3	0,437 8	15.423 6	−1.719 3	0,481 4	0.231 8
4,452 2	7.879 9	−1,514 1	−2,857 0	−0,625 3	8.162 3	1.786 4	−0.593 5	0.352 3
4.452 2	13.442 2	1.387 4	−0.220 9	0,749 8	0.048 8	−0.165 6	0,752 3	0.565 9
2,901 9	11,063 6	−2,180 7	1.173 2	−1,205 7	1.376 4	−1.414 5	−1,218 7	1,485 2
2,901 9	13.671 0	0.129 7	2.703 8	0.150 6	7,310 8	0.407 3	0,120 6	0.014 5
2,901 9	17.241 6	0.483 8	4.799 9	0,358 5	23.038 7	1.720 8	0.305 2	0.093 1
22.062 2	68.919 9	−0.964 8			55,360 6	0.615 2	$\delta b = 0{,}011\,1$	2.742 9

Bảng 15 – Như Bảng 13 nhưng cho lần lặp thứ hai

x_i	$u(x_i)$	y_i	$u(y_i)$	t_i	x_i^*	z_i	f_i	g_i	h_i
				0.579 9	2.159 4				
1.200 0	0.200 0	3.400 0	0.200 0	4.414 6	1.287 3	0.228 9	2.101 1	2.704 7	0.480 8
1,900 0	0,200 0	4.400 0	0.200 0	4.414 6	1.792 2	−0.282 7	2.101 1	3,765 5	−0,594 1
2.900 0	0.200 0	7.200 0	0.200 0	4.414 6	3.036 5	0.357 9	2.101 1	6,379 9	0,751 9
4,000 0	0,200 0	8.500 0	0.400 0	2.885 8	3.821 2	−0.717 5	1.698 8	6,491 3	−1,218 9
4.700 0	0,200 0	10.800 0	0.400 0	2.885 8	4.717 7	0.070 9	1,698 8	8,014 2	0,120 5
5.900 0	0.200 0	13.500 0	0.400 0	2.885 8	5,944 8	0.179 6	1.698 8	10,098 8	0.305 1

Bảng 16 – Như Bảng 14 nhưng cho lần lặp thứ hai

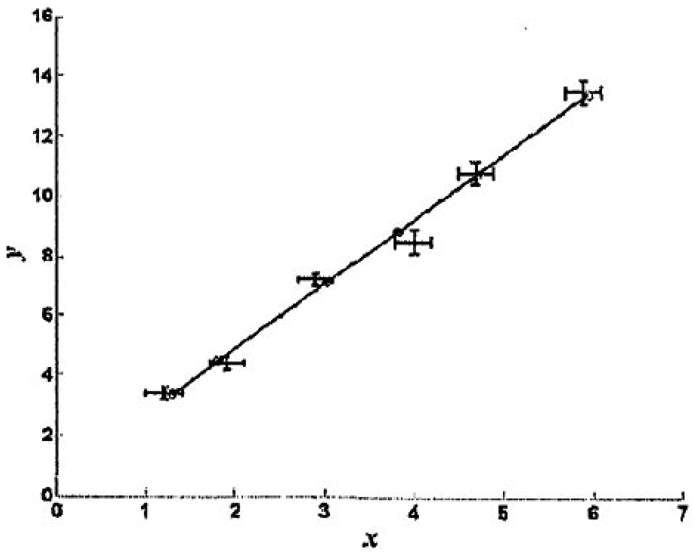
f_i^2	$f_i g_i$	$f_i h_i$	$\tilde{g}_i$	$\tilde{h}_i$	$\tilde{g}_i^2$	$\tilde{g}_i \tilde{h}_i$	r_i	r_i^2
			3.141 2	−0,000 3			$\delta a = -0{,}001\,0$	
4.414 6	5.682 7	1.010 3	−3.895 3	0.481 4	15,173 4	−1,875 1	0,482 3	0.232 6
4,414 6	7.911 7	−1.248 2	−2,834 4	−0,593 5	8.033 9	1.682 2	−0.592 8	0.351 4
4.414 6	13.404 7	1.579 8	−0.220 1	0.752 4	0,048 4	−0.165 6	0.752 5	0,566 2
2,885 8	11,027 1	−2.070 6	1.155 1	−1.218 4	1,334 2	−1.407 4	−1,218 7	1,485 2
2.885 8	13.614 3	0.204 6	2.678 1	0.120 9	7,172 0	0.323 8	0.120 3	0,014 5
2,885 8	17.155 5	0.518 3	4.762 6	0.305 6	22,682 4	1,455 3	0.304 4	0,092 7
21,901 2	68.796 1	−0.005 7			54.444 3	0.013 2	$\delta b = 0.000\,2$	2.742 7

Bảng 17 – Như Bảng 13 nhưng cho lần lặp thứ ba

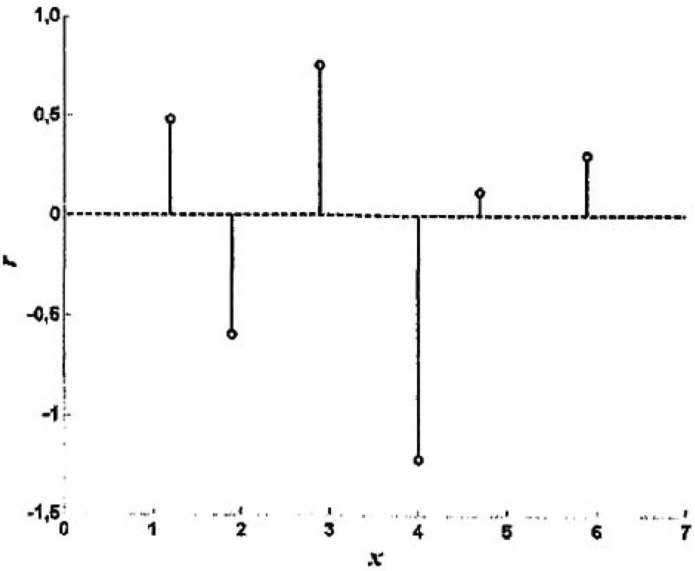
x_i	$u(x_i)$	y_i	$u(y_i)$	t_i	x_i^*	z_i	f_i	g_i	h_i
				0.578 8	2.159 7				
1.200 0	0.200 0	3,400 0	0.200 0	4,413 8	1.287 5	0.229 6	2.100 9	2.705 0	0,482 3
1.900 0	0,200 0	4,400 0	0.200 0	4.413 8	1.792 4	−0,282 2	2.100 9	3.765 7	−0.592 8
2.900 0	0.200 0	7,200 0	0,200 0	4.413 8	3.036 6	0.358 2	2.100 9	6.379 5	0.752 5
4.000 0	0.200 0	8,500 0	0.400 0	2.885 5	3,821 2	−0,717 4	1,698 7	6.490 9	−1.218 7
4.700 0	0.200 0	10,800 0	0.400 0	2,885 5	4,717 6	0.070 8	1.698 7	8.013 7	0,120 3
5.900 0	0.200 0	13,500 0	0.400 0	2.885 5	5.944 7	0,179 2	1.698 7	10.098 0	0.304 4

Bảng 18 – Như Bảng 14 nhưng cho lần lặp thứ ba

f_i^2	$f_i g_i$	$f_i h_i$	$\tilde{g}_i$	$\tilde{h}_i$	$\tilde{g}_i^2$	$\tilde{g}_i \tilde{h}_i$	r_i	r_i^2
			3.141 4	0.000 0			δa = 0.000 0	
4.413 8	5.682 9	1.013 3	−3.894 7	0.452 3	15.168 5	−1.878 5	0.482 3	0.232 7
4.413 8	7.911 3	−1.245 4	−2.834 0	−0.592 8	8.031 5	1.680 0	−0.592 8	0.351 4
4.413 8	13.402 7	1.580 9	−0.220 2	0.752 5	0.048 5	−0.165 7	0.752 5	0.566 2
2.885 5	11.025 8	−2.070 2	1.154 8	−1.218 7	1.333 5	−1.407 3	−1.218 7	1.485 2
2.885 5	13.612 6	0.204 3	2.677 6	0.120 3	7.169 5	0.322 0	0.120 3	0.014 5
2.885 5	17.153 1	0.517 1	4.761 9	0.304 4	22.675 6	1.449 6	0.304 4	0.092 7
21.897 7	68.788 4	0.000 0			54.427 1	0.000 1	δb = 0.000 0	2.742 7



Hình 6 – Dữ liệu trong Bảng 10 và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp thu được trong Bảng 11 đến 18



Hình 7 – Khoảng cách có trọng số thu được trong Bảng 18

8 Mô hình độ không đảm bảo gắn với x_i và y_i và hiệp phương sai gắn với cặp (x_i, y_i)

8.1 Khái quát

8.1.1 Điều này xem xét trường hợp 5.3.2 c), tức là khi thông tin sau đây được cung cấp cho $i = 1,\ldots, m$:

a) dữ liệu đo (x_i, y_i),

b) độ không đảm bảo chuẩn $u(x_i)$ gắn với x_i,

c) độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với y_i, và

d) hiệp phương sai $\text{cov}(x_i, y_i)$ gắn với x_i và y_i.

Phụ lục D cung cấp hướng dẫn về việc thu được các độ không đảm bảo và hiệp phương sai này. Tất cả các hiệp phương sai khác gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể.

8.1.2 Trường hợp 5.3.2 c) tương ứng với mô tả bởi mô hình thống kê

$$x_i = X_i^* + d_i, \quad y_i = Y_i^* + e_i, \quad Y_i^* = A^* + B^* X_i^*, \quad i = 1,\ldots, m \tag{10}$$

trong đó mỗi cặp (d_i, e_i) là thể hiện của các biến ngẫu nhiên hai chiều với kỳ vọng $(0,0)^T$ và ma trận hiệp phương sai có thành phần đường chéo $u^2(x_i)$ và $u^2(y_i)$và thành phần ngoài đường chéo cov (x_i, y_i) = $\text{cov}(y_i, x_i)$, tức là

$$\begin{bmatrix} u^2(x_i) & \text{cov}(x_i, y_i) \\ \text{cov}(y_i, x_i) & u^2(y_i) \end{bmatrix},$$

độc lập với các biến ngẫu nhiên khác.

CHÚ THÍCH: Giả định rằng (d_i, e_i) là các thể hiện của biến ngẫu nhiên chuẩn hai chiều chỉ cần thiết cho việc xác nhận giá trị sử dụng của mô hình (10).

8.2 Ước lượng tham số hiệu chuẩn và độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai kèm theo

8.2.1 Về thuật toán, trường hợp này có thể được xử lý bằng cách mở rộng (xem Phụ lục B) xử lý trong Điều 7. Các tính toán giống hệt như trong Điều 7, ngoại trừ bước 2 trong 7.2.1 được thay bằng

2 Đặt $$t_i = \frac{1}{u^2(y_i) - 2\tilde{b}\,\text{cov}(x_i, y_i) + \tilde{b}^2 u^2(x_i)},$$

$$x_i^* = \left\{ \left[u^2(y_i) - \tilde{b}\,\text{cov}(x_i, y_i) x_i\right] - \left[\text{cov}(x_i, y_i) - \tilde{b}\, u^2(x_i)\right](y_i - \tilde{a}) \right\} t_i \text{ và}$$

$$z_i = y_i - \tilde{a} - \tilde{b} x_i, i = 1, \ldots, m;$$

8.2.2 Tất cả các tính chất nêu trong 7.2.2 áp dụng cho dữ liệu được tạo ra theo mô hình (10) và tuân thủ theo phần còn lại của Điều 7.

9 Mô hình độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với y_i

9.1 Khái quát

9.1.1 Điều này xem xét trường hợp 5.3.2 d), tức là khi thông tin sau đây được cung cấp cho $i = 1,\dots, m$:

a) dữ liệu đo (x_i, y_i),

b) độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với y_i, và

c) hiệp phương sai $\mathrm{cov}(y_i, y_j)$ gắn với cặp (y_i, y_j) $j = 1,\dots,m, j \neq i$.

9.1.2 Độ không đảm bảo chuẩn bình phương và hiệp phương sai bao gồm ma trận hiệp phương sai

$$U_y = \begin{bmatrix} u^2(y_1) & \mathrm{cov}(y_1, y_2) & \dots & \mathrm{cov}(y_1, y_{m-1}) & \mathrm{cov}(y_1, y_m) \\ \mathrm{cov}(y_2, y_1) & u^2(y_2) & \dots & \mathrm{cov}(y_2, y_{m-1}) & \mathrm{cov}(y_2, y_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathrm{cov}(y_{m-1}, y_1) & \mathrm{cov}(y_{m-1}, y_2) & \dots & u^2(y_{m-1}) & \mathrm{cov}(y_{m-1}, y_m) \\ \mathrm{cov}(y_m, y_1) & \mathrm{cov}(y_m, y_2) & \dots & \mathrm{cov}(y_m, y_{m-1}) & u^2(y_m) \end{bmatrix}$$

kích thước $m \times m$ gắn với $y = (y_1,\dots,y_m)^T$. Phụ lục D cung cấp hướng dẫn về việc thu được các độ không đảm bảo và hiệp phương sai này. Tất cả các độ không đảm bảo và hiệp phương sai khác gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể.

9.1.3 Trường hợp 5.3.2 d) tương ứng với mô tả bởi mô hình thống kê

$$y_i = A^* + B^* x_i + e_i, \qquad i = 1,\dots, m \tag{11}$$

trong đó $e = (e_1,\dots, e_m)^T$ là thể hiện của biến ngẫu nhiên đa biến với kỳ vọng véc tơ bằng véc tơ 0 có kích thước $m \times 1$ và ma trận hiệp phương sai có kích thước $m \times m$ bằng U_y [21].

9.1.4 Các ước lượng a và b là giá trị tối thiểu hóa tổng các bình phương tổng quát [8]

$$\begin{bmatrix} y_1 - (A + Bx_1) \\ \vdots \\ y_m - (A + Bx_m) \end{bmatrix}^T U_y^{-1} \begin{bmatrix} y_1 - (A + Bx_1) \\ \vdots \\ y_m - (A + Bx_m) \end{bmatrix} = e^T U_y^{-1} e. \tag{12}$$

trong đó $e = y - A1 - Bx$, đối với A và B. Vấn đề xác định a và b trong bối cảnh này được gọi là một trong hồi quy Gauss-Markov (GMR) [2].

CHÚ THÍCH: Đối với trường hợp trong đó U_y là đường chéo, tổng bình phương tổng quát hóa (12) đơn giản thành biểu thức (4) trong 6.1.3 dẫn đến vấn đề WLS.

9.2 Ước lượng tham số hiệu chuẩn và độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai kèm theo

9.2.1 Nếu U_y hoàn toàn dương, thì tồn tại thừa số Cholesky L_y tam giác dưới kích thước $m \times m$ của $U_y = L_y L_y^T$ [10] (xem thêm A.4), ước lượng a và b của A và B có thể được tính trực tiếp bằng cách sử dụng cùng một quy trình chung như trong 6.2.1 sau một số tính toán sơ bộ sử dụng thao tác ma trận-véc tơ. Nếu không có thể cần đến nhiều phương pháp số học hơn. Các thao tác này chuyển đổi tổng bình phương tổng quát hóa (12) thành tổng bình phương thông thường (2) như trong 5.8.1, tức là, vấn đề trở thành bình phương tối thiểu không trọng số và không có hiệp phương sai.

9.2.2 Ước lượng tham số *a* và *b* được tính ở các bước từ 1 đến 7 dưới đây; độ không đảm bảo chuẩn *u(a)* và *u(b)* và hiệp phương sai cov(*a*,*b*) được đánh giá trong bước 8:

1 Tính thừa số Cholesky L_y kích thước $m \times m$ của $U_y = L_y L_y^{\mathrm{T}}$; xem A.4.1;

2 Lấy 1 là véc tơ của một có kích thước $m \times 1$. Giải ba hệ thức tam giác dưới $L_y f = 1$, $L_y g = x$ và $L_y h = y$, trong đó $f = (f_1, \ldots, f_m)^{\mathrm{T}}, \ldots$ đối với f, g và h; xem A.4.3;

3 Đặt $F^2 = \sum_{i=1}^{m} f_i^2$;

4 Đặt $g_0 = \frac{1}{F^2}\sum_{i=1}^{m} f_i g_i$ và $h_0 = \frac{1}{F^2}\sum_{i=1}^{m} f_i h_i$;

5 Đặt $\tilde{g}_i = g_i - g_0 f_i$ và $\tilde{h}_i = h_i - h_0 f_i$, $i = 1, \ldots, m$;

6 Đặt $\tilde{G}^2 = \sum_{i=1}^{m} \tilde{g}_i^2$;

7 Đặt $b = \frac{1}{\tilde{G}^2} = \sum_{i=1}^{m} \tilde{g}_i \tilde{h}_i$ và $a = h_0 - b g_0$;

8 Đặt $u^2(a) = \frac{1}{F^2} + \frac{g_0^2}{\tilde{G}^2}$, $u^2(b) = \frac{1}{\tilde{G}^2}$ và $\mathrm{cov}(a,b) = -\frac{g_0}{\tilde{G}^2}$

9.2.3 Ước lượng *a* và *b* xác định trong 9.1.4 có các tính chất sau đây [15] đối với dữ liệu y_i theo mô hình (11):

i) Các ước lượng *a* và *b* được cho bởi tổ hợp tuyến tính các dữ liệu y_i.

ii) Các ước lượng *a* và *b* được coi là các thể hiện của biến ngẫu nhiên có kỳ vọng tương ứng là A^* và B^*.

iii) Ma trận hiệp phương sai đối với biến ngẫu nhiên trong ii) được quy định là $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(*a*,*b*) tính được trong 9.2.2.

Tính chất i) nêu rõ *a* và *b* được rút ra bằng cách sử dụng phương pháp ước lượng tuyến tính. Tính chất ii) nêu rõ rằng phương pháp ước lượng tuyến tính là không chệch. Tính chất ii) và iii) cùng cho thấy rằng phương pháp ước lượng là nhất quán theo nghĩa khi số lượng m điểm dữ liệu tăng lên, thì ước lượng *a* và *b* hội tụ A^* và B^*, tương ứng.

Phương pháp ước lượng của 9.1.4 có tính chất tối ưu sau đây đối với dữ liệu y_i theo mô hình (11):

iv) Các ước lượng $\breve{a}$ và $\breve{b}$ cung cấp bởi phương pháp ước lượng tuyến tính không chệch bất kỳ có thể được coi là các thể hiện của biến ngẫu nhiên có phương sai ít nhất là lớn bằng phương sai gắn với phương pháp ước lượng GMR.

Tính chất iv) có thể được giải thích như dưới đây. Đối với hằng số c và d, độ không đảm bảo chuẩn $u(c\tilde{a} + d\tilde{b})$ gắn với tổ hợp tuyến tính các ước lượng $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ cung cấp bởi phương pháp ước lượng tuyến tính không chệch bất kỳ ít nhất là lớn bằng $u(ca + db)$. Các tính chất từ i) đến iv) chứng tỏ việc sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu cho dữ liệu tương thích với mô hình (11). Lưu ý là khi sử dụng mô hình này, các tuyên bố chỉ được đưa ra về kỳ vọng và phương sai gắn với e_i; các phân bố kèm theo không được quy định thêm. Nếu đưa ra giả định bổ sung rằng e_i là thể hiện của biến ngẫu nhiên đặc trưng bởi phân bố chuẩn nhiều chiều thì khi đó các tính chất khác gắn với phương pháp ước lượng GMR có thể đưa ra:

v) Các biến ngẫu nhiên trong ii) được đặc trưng bởi phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở A^* và B^*với ma trận hiệp phương sai quy định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b).

vi) Các ước lượng a và b là ước lượng hợp lý lớn nhất, tương ứng với giá trị hợp lý nhất của A và B có thể làm tăng dữ liệu đo quan trắc được y_i.

vii) Trong bối cảnh suy luận Bayes, phân bố trong phạm vi kiến thức cho A và B, đã cho dữ liệu đo quan trắc y_i, là phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở a và b với ma trận hiệp phương sai xác định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b).

CHÚ THÍCH 1: Các tính chất liệt kê ở trên giống với trong phương pháp ước lượng WLS của 6.1.3 đối với dữ liệu tạo ra theo mô hình (3).

CHÚ THÍCH 2: $u^2(a)$, $u^2(b)$ và cov(a,b) trong bước 8 thu được bằng cách áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008) cho a và b như cung cấp bởi các bước từ 1 đến 7.

9.3 Xác nhận giá trị sử dụng của mô hình

Nếu m > 2 thì giá trị sử dụng của mô hình có thể kiểm nghiệm một phần bằng cách sử dụng phần dư r_i có trọng số (tiếp theo 9.2.2):

9 Thiết lập $r_i = \tilde{h}_i - b\tilde{g}_i$, i = 1,..., m;

10 Thiết lập giá trị Khi-bình phương quan trắc được $\chi^2_{obs} = \sum_{i=1}^{m} r_i^2$ và bậc tự do $\nu = m - 2$;

11 Kiểm tra xem χ^2_{obs} có vượt quá phân vị 95 % của χ^2_ν không, và xem liệu có bác bỏ mô hình đường thẳng hay không.

CHÚ THÍCH: Kiểm nghiệm Khi-bình phương dựa trên giả định là e_i trong mô hình (11) là các thể hiện của biến ngẫu nhiên chuẩn độc lập đặc trưng bởi phân bố chuẩn nhiều chiều.

9.4 Tổ chức tính toán

Các tính toán trong 9.2.2 và 9.3 có thể được tổ chức thành các bảng như trong các bảng từ 19 đến 21. Bảng 20 chứa f_i, g_i và h_i tính được ở bước 1 và 2 trong 9.2.2 đối với thừa số hóa Cholesky L_y của ma trận hiệp phương sai U_y. Bảng 21 sử dụng các f_i, g_i và h_i này để tính các ước lượng a và b của tham số hàm hiệu chuẩn đường thẳng.

Bảng 19 – Dữ liệu cho hàm hiệu chuẩn đường thẳng Gauss-Markov

x_1	y_1
x_2	y_2
$\vdots$	$\vdots$
x_m	y_m

Bảng 20 – Tính toán ban đầu để xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng Gauss-Markov

9.2.2 bước 1, 2

f_1	g_1	h_1
f_2	g_2	h_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
f_m	g_m	h_m

Bảng 21 – Tổ chức tính toán để xác định hàm hiệu chuẩn đường thẳng Gauss-Markov

9.2.2 bước 4, 5 — 9.2.2 bước 7, 9.3 bước 9 — 9.3 bước 10

			g_0	h_0			a	
f_1^2	f_1g_1	f_1h_1	$\tilde{g}_1$	$\tilde{h}_1$	$\tilde{g}_1^2$	$\tilde{g}_1\tilde{h}_1$	r_1	r_1^2
f_2^2	f_2g_2	f_2h_2	$\tilde{g}_2$	$\tilde{h}_2$	$\tilde{g}_2^2$	$\tilde{g}_2\tilde{h}_2$	r_2	r_2^2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
f_m^2	f_mg_m	f_mh_m	$\tilde{g}_m$	$\tilde{h}_m$	$\tilde{g}_m^2$	$\tilde{g}_m\tilde{h}_m$	r_m	r_m^2
$F^2=\sum f_i^2$	$\sum f_ig_i$	$\sum f_ih_i$			$\tilde{G}^2=\sum \tilde{g}_i^2$	$\sum \tilde{g}_i\tilde{h}_i$	δb	$\chi^2_{obs}=\sum r_i^2$

VÍ DỤ: Bảng 22 đưa ra mười điểm dữ liệu đo được (x_i, y_i) và độ không đảm bảo chuẩn gắn với y_i.

Dữ liệu thu được bằng cách sử dụng mô hình mô tả trong D.2.2 với u_R = 1,0, $u_{S,1}$ = 1,0 và $u_{S,2}$ = 2,0.

Bảng 22 – Dữ liệu thể hiện mười điểm đo, y_i có ma trận hiệp phương sai kèm theo

x_i	y_i
1,0	1,3
2,0	4,1
3,0	6,9
4,0	7,5
5,0	10,2
6,0	12,0
7,0	14,5
8,0	17,1
9,0	19,5
10,0	21,0

Ma trận hiệp phương sai U_y kích thước 10 x 10 gắn với y_i là

$$
U_y = \begin{bmatrix}
2{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 \\
1{,}0 & 2{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 \\
1{,}0 & 1{,}0 & 2{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 \\
1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 2{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 \\
1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 2{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 \\
0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 5{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 \\
0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 4{,}0 & 5{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 \\
0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 5{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 \\
0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 5{,}0 & 4{,}0 \\
0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 0{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 4{,}0 & 5{,}0
\end{bmatrix}.
$$

Thừa số Cholesky L_y kích thước 10 x 10 của $U_y = L_y L_y^T$, tính được sử dụng một trong hai thuật toán mô tả trong A.4.1, là

$$
L_y = \begin{bmatrix}
1{,}414\,2 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}707\,1 & 1{,}224\,7 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}707\,1 & 0{,}408\,2 & 1{,}154\,7 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}707\,1 & 0{,}408\,2 & 0{,}288\,7 & 1{,}118\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}707\,1 & 0{,}408\,2 & 0{,}288\,7 & 0{,}223\,6 & 1{,}095\,4 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 2{,}236\,1 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 1{,}788\,9 & 1{,}341\,6 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 1{,}788\,9 & 0{,}596\,3 & 1{,}201\,9 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 \\
0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 1{,}788\,9 & 0{,}596\,3 & 0{,}369\,8 & 1{,}143\,5 & 0{,}000\,0 \\
0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 0{,}000\,0 & 1{,}788\,9 & 0{,}596\,3 & 0{,}369\,8 & 0{,}269\,1 & 1{,}111\,4
\end{bmatrix}.
$$

Các véc tơ f, g và h trong Bảng 23 được tính theo bước 2 trong 9.2.2.

Bảng 23 – Tính toán ban đầu bảng kèm theo dữ liệu trong Bảng 22

f_i	g_i	h_i
0,707 1	0,707 1	0,919 2
0,408 2	1,224 7	2,816 9
0,288 7	1,732 1	4,416 7
0,223 6	2,236 1	3,957 8
0,182 6	2,738 6	5,696 3
0,447 2	2,683 3	5,366 6
0,149 1	1,639 8	3,652 2
0,092 5	1,849 0	4,428 4
0,067 3	2,219 8	5,320 8
0,052 9	2,646 3	5,536 0

Tham số đường thẳng khớp nhất trong Bảng 24 được tính theo Bảng 21. Từ Bảng 24, g_0 =4,404 8/1,071 4 = 4,111 1, h_0 = 9,004 8/1,071 4 = 8,404 4, b = 54,218 5/24,629 6 = 2,201 4 và a = 8,404 4 – (2,201 4)(4,111 1) = –0,645 6.

Bảng 24 – Bảng tính toán kèm theo với dữ liệu trong Bảng 22

f_i^2	$f_i g_i$	$f_i h_i$	$\tilde{g}_i$	$\tilde{h}_i$	$\tilde{g}_i^2$	$\tilde{g}_i \tilde{h}_i$	r_i	r_i^2
			4,111 1	8,404 4			$a = -0{,}645\,6$	
0,500 0	0,500 0	0,650 0	−2,199 9	−5,023 6	4,839 5	11,051 4	−0,180 9	0,032 7
0,166 7	0,500 0	1,150 0	−0,453 6	−0,614 2	0,205 8	0,278 6	0,384 4	0,147 7
0,083 3	0,500 0	1,273 0	0,545 3	1,990 6	0,297 3	1,085 4	0,790 2	0,624 5
0,050 0	0,500 0	0,885 0	1,316 8	2,078 5	1,734 0	2,737 0	−0,820 2	0,672 7
0,033 3	0,500 0	1,040 0	1,988 0	4,161 9	3,952 3	8,273 9	−0,214 5	0,046 0
0,200 0	1,200 0	2,400 0	0,844 7	1,608 0	0,713 6	1,338 3	−0,251 6	0,063 3
0,022 2	0,244 4	0,544 4	1,026 9	2,399 4	1,054 6	2,464 0	0,138 7	0,019 2
0,008 5	0,170 9	0,409 4	1,468 9	3,651 4	2,157 8	5,363 6	0,417 7	0,174 5
0,004 5	0,149 3	0,357 9	1,943 3	4,755 5	3,776 3	9,241 2	0,477 7	0,228 2
0,002 8	0,140 1	0,293 0	2,428 7	5,091 2	5,898 6	12,365 0	−0,255 2	0,065 1
1,071 4	4,404 8	9,004 8			24,629 6	54,218 5	$b = 2{,}201\,4$	2,074 0

Các độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai gắn với a và b được đánh giá từ Bảng 24 sử dụng bước 8 trong 9.2.2:

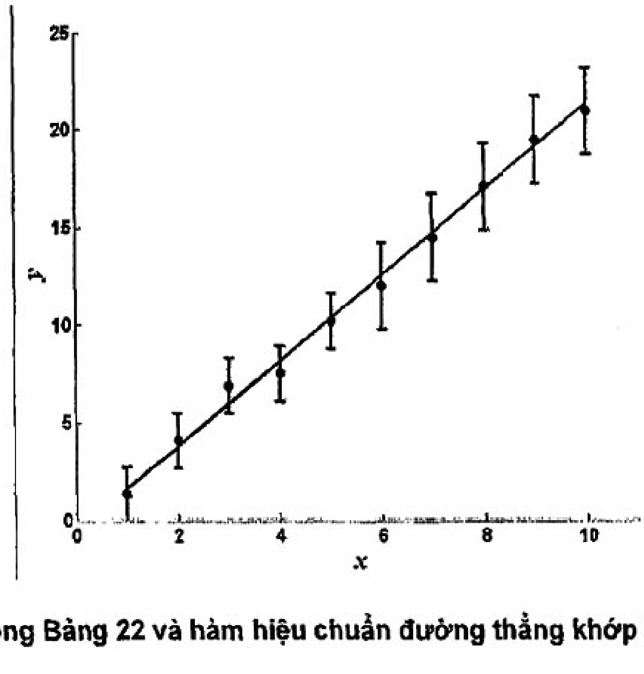
$u^2(a)$ = 1/1,071 4 + (4,111 1)²/24,629 6 như vậy $u(a)$ = 1,272 6;

$u^2(b)$ = 1/24,629 6, như vậy $u(b)$ = 0,201 5;

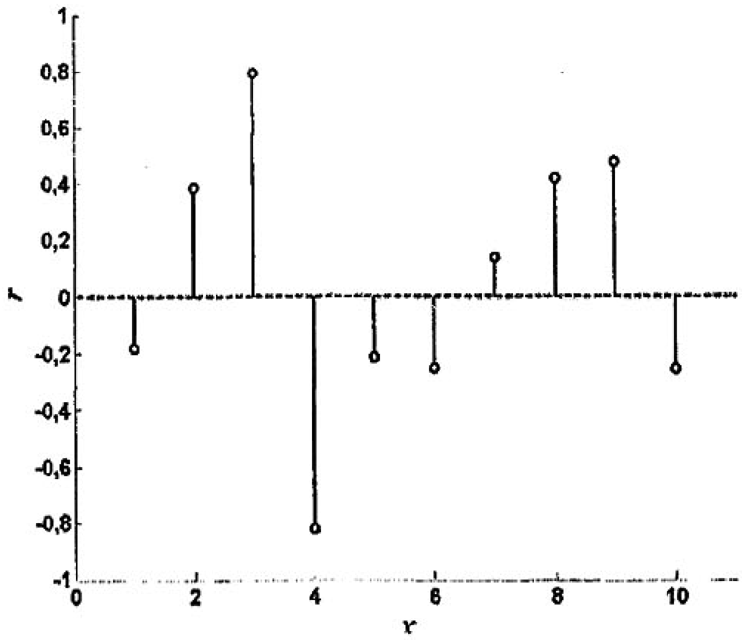
$u(a,b)$= −4,111 1/24,629 6 = −0,166 9.

Giá trị Khi-bình phương quan trắc được là χ^2_{obs} = 2,074 với 8 bậc tự do, như tính được trong Bảng 24 sử dụng 9.3. Vì χ^2_{obs} không vượt quá phân vị 95 % của χ^2_{ν}, tức là 15,507, nên không có lý do để nghi ngờ sự nhất quán của mô hình đường thẳng và dữ liệu.

Các điểm dữ liệu và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp như trình bày trên Hình 8. Phần dư có trọng số được minh họa trên Hình 9.



Hình 8 – Dữ liệu trong Bảng 22 và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp thu được trong Bảng 24



Hình 9 – Phần dư có trọng số r_i tính được trong Bảng 24

10 Mô hình độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với x_i và y_i

10.1 Khái quát

10.1.1 Điều này xem xét trường hợp 5.3.2 e), tức là trường hợp chung nhất trong đó tất cả các dữ liệu đo đều kèm theo độ không đảm bảo và hiệp phương sai. Phụ lục D cung cấp hướng dẫn để thu được các độ không đảm bảo và hiệp phương sai này.

10.1.2 Độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai bao gồm ma trận hiệp phương sai

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

kích thước $2m$ x $2m$ gắn với véc tơ $(x_1,\ldots, x_m, y_1,\ldots, y_m)^T$ của dữ liệu đo kích thước $2m$ x 1.

10.1.3 Trường hợp 5.3.2 e) tương ứng với mô tả bởi mô hình thống kê

$$x_i = X_i^* + d_i, \qquad y_i = Y_i^* + e_i, \qquad Y_i^* = A^* + B^* X_i^*, \qquad i = 1,\ldots, m \tag{13}$$

trong đó véc tơ $(d_1,\ldots, d_m, e_1,\ldots, e_m)^T$ kích thước $2m$ x 1 là thể hiện của biến ngẫu nhiên đa biến với kỳ vọng véc tơ bằng véc tơ 0 có kích thước $2m$ x 1 và ma trận hiệp phương sai có kích thước $2m$ x $2m$ bằng U [21].

10.1.4 Các ước lượng a và b là giá trị tối thiểu hóa tổng các bình phương tổng quát

$$\begin{bmatrix} x_1 - X_1 \\ \vdots \\ x_m - X_m \\ y_1 - (A + BX_1) \\ \vdots \\ y_m - (A + BX_m) \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} U^{-1} \begin{bmatrix} x_1 - X_1 \\ \vdots \\ x_m - X_m \\ y_1 - (A + BX_1) \\ \vdots \\ y_m - (A + BX_m) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d \\ e \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} U^{-1} \begin{bmatrix} d \\ e \end{bmatrix}. \qquad (14)$$

trong đó $d = x - X$ và $e = y - A1 - Bx$, đối với A, B và X_i, $i = 1,..., m$. Vấn đề xác định a và b trong bối cảnh này được gọi là một trong hồi quy Gauss-Markov tổng quát hóa (GGMR) [2].

10.2 Ước lượng tham số hiệu chuẩn và độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai kèm theo

10.2.1 Nếu U hoàn toàn dương, thì tồn tại thừa số Cholesky L tam giác dưới kích thước $2m$ x $2m$ của $U = LL^{\mathrm{T}}$ [10] (xem thêm A.4), ước lượng a và b của A và B có thể được tính theo quy trình lặp sử dụng thao tác ma trận-véc tơ. Nếu không có thể cần đến nhiều phương pháp số học hơn. Các thao tác này chuyển đổi tổng bình phương tổng quát hóa (14) thành tổng bình phương thông thường (2) như trong 5.8.1, tức là, vấn đề trở thành bình phương tối thiểu không trọng số và không có hiệp phương sai. Quy trình lặp cũng liên quan đến các xấp xỉ x_i^*, xác định các điểm $(x_i^*, A + Bx_i^*)$ trên đường gần nhất với điểm dữ liệu đo được (x_i, y_i), trong đó độ gần được đo theo khoảng cách có trọng số, có tính đến thông tin về độ không đảm bảo xác định bởi U.

10.2.2 Ước lượng a và b được tính ở các bước từ 1 đến 10 dưới đây sử dụng quy trình lặp như nêu trong 6.2.1; độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$ và hiệp phương sai cov(a,b) được đánh giá trong bước 11:

1 Thu được các xấp xỉ ban đầu cho tham số $\widetilde{t} = \left(\widetilde{x}_1,...,\widetilde{x}_m,\widetilde{a},\widetilde{b}\right)^{\mathrm{T}}$;

2 Tính véc tơ kích thước $2m$ x 1,

$$f = \begin{bmatrix} x_1 - \widetilde{x}_1 \\ \vdots \\ x_m - \widetilde{x}_m \\ y_1 - \left(\widetilde{a} + \widetilde{b}\widetilde{x}_1\right) \\ \vdots \\ y_m - \left(\widetilde{a} + \widetilde{b}\widetilde{x}_m\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x - \widetilde{x} \\ y - \widetilde{a}1 - \widetilde{b}\widetilde{x} \end{bmatrix},$$

và ma trận (Jacobi) kích thước $2m$ x (m + 2).

$$J = \begin{bmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -\tilde{b} & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & -\tilde{x}_1 \\ 0 & -\tilde{b} & \cdots & 0 & 0 & -1 & -\tilde{x}_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\tilde{b} & 0 & -1 & -\tilde{x}_{m-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\tilde{b} & -1 & -\tilde{x}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -I & 0 & 0 \\ -\tilde{b}I & -1 & -\tilde{x} \end{bmatrix},$$

trong đó $\tilde{x} = (\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_m)^T$, $\tilde{a}$ và $\tilde{b}$ được trích từ ước lượng $\tilde{t}$ hiện tại của véc tơ tham số;

3 Tính thừa số Cholesky L kích thước $2m$ x $2m$ của $U = LL^T$ [10]; xem A.4.1;

4 Giải hệ tam giác dưới

$$L\tilde{f} = f \text{ và } L\tilde{J} = J,$$

để xác định véc tơ chuyển đổi $\tilde{f}$ kích thước $2m$ x 1 và ma trận chuyển đổi $\tilde{J}$ kích thước $2m$ x (m +2); xem A.4.3;

5 Từ véc tơ $g = \tilde{J}^T\tilde{f}$ có kích thước (m + 2) x 1 và ma trận $H = \tilde{J}^T\tilde{J}$ kích thước (m + 2) x (m + 2);

6 Xác định thừa số Cholesky M, ma trận tam giác dưới kích thước (m + 2) x (m + 2) trong $H = MM^T$; xem A.4.1;

7 Giải hệ tam giác dưới $Mq = -g$ để xác định véc tơ q kích thước (m + 2) x 1; xem A.4.3;

8 Giải hệ tam tác trên $M^T\delta t = q$ để xác định véc tơ hiệu chính δt kích thước (m + 2) x 1; xem A.4.4;

9 Cập nhật các xấp xỉ hiện tại cho các tham số: $\tilde{t} := \tilde{t} + \delta t$;

10 Lặp lại các bước từ 2 đến 9 cho đến khi đạt được sự hội tụ. Đặt $a = \tilde{a}$ và $b = \tilde{b}$ (các thành phần m + 1 và m + 2 của $\tilde{t}$);

11 Phân vùng M thu được trong bước 6 là

$$M = \begin{bmatrix} M_{11} & 0 \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix},$$

trong đó

$$M_{22} = \begin{bmatrix} m_{11} & 0 \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix},$$

là ma trận con tam giác dưới phía dưới bên phải kích thước 2 x 2 của M. Khi đó

$$u^2(a)=\frac{m_{22}^2+m_{21}^2}{m_{11}^2 m_{22}^2}, \qquad u^2(b)=\frac{m_{11}^2}{m_{11}^2 m_{22}^2}=\frac{1}{m_{22}^2}, \text{ và } \operatorname{cov}(a,b)=\frac{m_{21}}{m_{11}m_{22}^2}.$$

CHÚ THÍCH 1: Trong bước 1, các xấp xỉ ban đầu được cung cấp bởi $\tilde{t} = (x_1,\ldots, x_m, a_0, b_0)^T$, trong đó a_0 và b_0 là giá trị tham số đường thẳng xác định bởi bình phương tối thiểu có trọng số khớp với dữ liệu; xem 6.2.1.

CHÚ THÍCH 2: Trong bước 8, véc tơ hiệu chính δt thường sẽ giảm về độ lớn bằng hệ số hằng số gần đúng giữa các phép lặp. Mức độ giảm phụ thuộc chủ yếu vào độ không đảm bảo gắn với dữ liệu: độ không đảm bảo càng nhỏ thì mức giảm sẽ càng nhiều. Quy trình lặp có thể kết thúc khi độ lớn của các hiệu chính được điều chỉnh đến mức không đáng kể.

CHÚ THÍCH 3: Trong bước 8, hiệu chính δt được cho bởi phép giải bình phương tối thiểu của công thức ma trận

$$\tilde{J}\delta t = \tilde{f},$$

cách giải được xác định bởi công thức chuẩn

$$H = \tilde{J}^T\tilde{J}\delta t = -\tilde{J}\tilde{f} = -g.$$

CHÚ THÍCH 4: Các bước từ 5 đến 8 giải công thức chuẩn sử dụng thừa số Cholesky. Một cách tiếp cận bằng số ổn định hơn là sử dụng thừa số QR [10] của $\tilde{J}$ (xem A.5.1). Quy trình mô tả trong C.2 sử dụng thừa số QR và tránh các tính toán liên quan đến số nghịch đảo L như nêu trong bước 4.

CHÚ THÍCH 5: Về mặt ma trận, ma trận hiệp phương sai gắn với các ước lượng a và b là

$$U_a = M_{22}^{-T} M_{22}^{-1}$$

CHÚ THÍCH 6: Một cách tiếp cận tổng quát hơn và ổn định hơn bằng số để giải quyết vấn đề hồi quy Gauss-Markov tổng quát được nêu trong C.2. Cách tiếp cận ở trên giả định rằng ma trận U là hoàn toàn dương và không thể hiện bất kỳ mối tương quan mạnh nào.

CHÚ THÍCH 7: $u^2(a)$, $u^2(b)$ và $\operatorname{cov}(a,b)$ trong bước 11 thu được bằng cách áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008) cho a và b như cung cấp bởi các bước từ 1 đến 10.

10.2.3 Thực tế là các ước lượng a và b xác định bằng cách tối thiểu hóa tổng bình phương (14) phụ thuộc phi tuyến vào dữ liệu x_i và y_i nghĩa là không thể dễ dàng nêu ra các tính chất đối với GGMR. Các ước lượng a và b xác định trong 10.1.4 có các tính chất sau đây đối với dữ liệu x_i và y_i theo mô hình (13):

i) Các ước lượng a và b được cho bởi hàm phi tuyến các dữ liệu x_i và y_i.

ii) Các ước lượng a và b có thể được coi là các thể hiện của biến ngẫu nhiên có kỳ vọng tương ứng là A^* và B^*.

iii) Các thành phần của ma trận hiệp phương sai đối với biến ngẫu nhiên trong ii) được lấy xấp xỉ bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và $\operatorname{cov}(a,b)$ tính được trong 10.2.2.

Các xấp xỉ ở trên sẽ chính xác hơn đối với dữ liệu có độ không đảm bảo kèm theo nhỏ hơn. Tuy nhiên, phương pháp ước lượng có tính chất nhất quán sau đây:

iv) Đối với dữ liệu thỏa mãn mô hình (13), khi số m điểm dữ liệu tăng thì các ước lượng a và b hội tụ A^* và B^*, tương ứng [16].

Nếu đưa ra giả định bổ sung rằng d_i và e_i là thể hiện của biến ngẫu nhiên đặc trưng bởi phân bố chuẩn nhiều chiều thì khi đó các tính chất khác gắn với phương pháp ước lượng GGMR có thể đưa ra:

v) Các biến ngẫu nhiên trong ii) được đặc trưng gần đúng bởi phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở A^* và B^* với ma trận hiệp phương sai quy định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và $\mathrm{cov}(a,b)$.

vi) Các ước lượng a và b là ước lượng hợp lý lớn nhất, tương ứng với giá trị hợp lý nhất của A và B, có thể làm tăng dữ liệu đo quan trắc được x_i và y_i.

vii) Trong bối cảnh suy luận Bayes, phân bố trong phạm vi kiến thức cho A và B, đã cho dữ liệu đo quan trắc x_i và y_i, xấp xỉ phân bố chuẩn hai chiều tập trung ở a và b với ma trận hiệp phương sai xác định bởi $u^2(a)$, $u^2(b)$ và $\mathrm{cov}(a,b)$.

10.3 Xác nhận giá trị sử dụng của mô hình

Nếu $m > 2$ thì giá trị sử dụng của mô hình có thể kiểm nghiệm một phần bằng cách sử dụng phần dư $\tilde{f}_i$ có trọng số (tiếp theo 10.2.2):

12 Thiết lập giá trị Khi-bình phương quan trắc được $\chi^2_{obs} = \sum_{i=1}^{m} \tilde{f}_i^2$ và bậc tự do $\nu = m - 2$;

13 Kiểm tra xem χ^2_{obs} có vượt quá phân vị 95 % của χ^2_{ν} không, và xem liệu có bác bỏ mô hình đường thẳng hay không.

CHÚ THÍCH: Kiểm nghiệm Khi-bình phương dựa trên giả định là d_i và e_i trong mô hình (13) là các thể hiện của biến ngẫu nhiên đặc trưng bởi phân bố chuẩn nhiều chiều và dựa trên xấp xỉ bậc một.

VÍ DỤ: Bảng 25 đưa ra bảy điểm dữ liệu đo được (x_i, y_i) thu được bằng cách sử dụng các mô hình đo mô tả trong D.2 và D.4.

Ma trận hiệp phương sai gắn với y_i được rút ra bằng cách sử dụng mô hình đo (D.1) với $u_S = 2,0$ và $u_R = 1,0$.

Dữ liệu x_i và ma trận hiệp phương sai kèm theo được rút ra bằng cách sử dụng mô hình (D.2) với $z_1 = 50$, $z_2 = 100$, $z_3 = 200$, $u(z_1) = 0,5$, $u(z_2) = u(z_3) = 1,0$ và $u_{D,i} = 0,5$.

Bảng 25 – Dữ liệu thể hiện bảy điểm đo, x_i và y_i có ma trận hiệp phương sai kèm theo

x_i	y_i
50,4	52,3
99,0	97,8
149,9	149,7
200,4	200,1
248,5	250,4
299,7	300,9
349,1	349,2

Ma trận hiệp phương sai U_x kích thước 7 x 7 gắn với x_i là

$$U_x = \begin{bmatrix} 0.50 & 0.00 & 0.25 & 0.00 & 0.25 & 0.00 & 0.25 \\ 0.00 & 1.25 & 1,00 & 0.00 & 0.00 & 1.00 & 1,00 \\ 0.25 & 1.00 & 1.50 & 0.00 & 0.25 & 1.00 & 1.25 \\ 0.00 & 0.00 & 0.00 & 1.25 & 1.00 & 1.00 & 1.00 \\ 0,25 & 0.00 & 0.25 & 1.00 & 1.50 & 1.00 & 1,25 \\ 0.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 2.25 & 2.00 \\ 0.25 & 1.00 & 1.25 & 1.00 & 1.25 & 2.00 & 2,50 \end{bmatrix}.$$

Thừa số Cholesky L_x kích thước 7 x 7 của $U_x = L_xL_x^{\mathrm{T}}$, tính được sử dụng một trong hai thuật toán mô tả trong A.4.1, là

$$L_x = \begin{bmatrix} 0.707\,1 & 0.000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0.000\,0 & 0.000\,0 & 0,000\,0 \\ 0.000\,0 & 1.118\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0.000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,353\,6 & 0,894\,4 & 0.758\,3 & 0.000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0.000\,0 \\ 0.000\,0 & 0.000\,0 & 0,000\,0 & 1,118\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0.000\,0 \\ 0.353\,6 & 0.000\,0 & 0,164\,8 & 0.894\,4 & 0.740\,2 & 0,000\,0 & 0.000\,0 \\ 0.000\,0 & 0.894\,4 & 0.263\,8 & 0.894\,4 & 0.211\,5 & 0,731\,9 & 0,000\,0 \\ 0.353\,6 & 0.894\,4 & 0.428\,6 & 0,894\,4 & 0.343\,6 & 0,292\,8 & 0.622\,5 \end{bmatrix}.$$

Ma trận hiệp phương sai U_y kích thước 7 x 7 gắn với y_i là

$$U_y = \begin{bmatrix} 5,00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 \\ 1,00 & 5.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 & 5.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 \\ 1,00 & 1.00 & 1.00 & 5.00 & 1,00 & 1.00 & 1,00 \\ 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1.00 & 5.00 & 1.00 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1,00 & 1.00 & 5.00 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 & 1.00 & 1,00 & 1.00 & 1.00 & 5.00 \end{bmatrix}.$$

Thừa số Cholesky L_y kích thước 7 x 7 của $U_y = L_yL_y^{\mathrm{T}}$, tính được sử dụng một trong hai thuật toán mô tả trong A.4.1, là

$$L_y = \begin{bmatrix} 2,236\,1 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0.000\,0 \\ 0,447\,2 & 2.190\,9 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0.447\,2 & 0,365\,1 & 2,160\,2 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0.000\,0 & 0,000\,0 \\ 0.447\,2 & 0,365\,1 & 0,308\,6 & 2.138\,1 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,447\,2 & 0,365\,1 & 0,308\,6 & 0,267\,3 & 2,121\,3 & 0.000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,447\,2 & 0.365\,1 & 0,308\,6 & 0.267\,3 & 0,235\,7 & 2,108\,2 & 0.000\,0 \\ 0,447\,2 & 0,365\,1 & 0,308\,6 & 0,267\,3 & 0,235\,7 & 0,210\,8 & 2,097\,6 \end{bmatrix}.$$

Ma trận hiệp phương sai U kích thước 14 x 14 được cho bởi

$$U = \begin{bmatrix} U_x & 0 \\ 0 & U_y \end{bmatrix}.$$

CHÚ THÍCH: Đối với ví dụ này, có mối tương quan gắn với từng cặp x_i và x_j và từng cặp y_i và y_j nhưng không có mối tương quan gắn với cặp x_i và y_j, tức là, $\mathrm{cov}(x_i, y_j) = 0$ đối với mọi i và j.

Thừa số Cholesky L kích thước 14 x 14 được cho bởi

$$L = \begin{bmatrix} L_x & 0 \\ 0 & L_y \end{bmatrix}.$$

Bình phương tối thiểu có trọng số khớp với dữ liệu (bước 1 đến 5 trong 6.2.1) cho các xấp xỉ $\tilde{a}$ = 0,270 7 và $\tilde{b}$ = 1,001 1. Quy trình lặp bắt đầu với $\tilde{t} = (x_1, \ldots, x_7, \tilde{a}, \tilde{b})^T$.

Bảng 26 đưa ra véc tơ ban đầu $\tilde{t}_0$, các hiệu chỉnh δt_k = đối với lần lặp thứ k, k = 1,...,4 và ước lượng cuối $\tilde{t} = \tilde{t}_4$.

Bảng 26 – Thay đổi véc tơ tham số $\tilde{t}$

$\tilde{t}_0$	$\delta t_1 \times 10^{-2}$	$\delta t_2 \times 10^{-4}$	$\delta t_3 \times 10^{-6}$	$\delta t_4 \times 10^{-8}$	$\tilde{t}_4$
50,400 0	17,253 1	1,258 0	3,078 2	0,290 4	50,572 7
99,000 0	−43,150 1	−3,214 5	−6,320 1	−0,710 1	98,568 2
149,900 0	−29,164 1	−3,960 4	−3,888 9	−0,756 4	149,608 0
200,400 0	2,967 7	−10,762 9	−0,602 4	−1,716 5	200,428 6
248,500 0	24,039 4	−11,406 4	3,237 8	−1,706 4	248,739 3
299,700 0	−22,251 0	−15,776 7	−3,358 1	−2,611 0	299,475 9
349,100 0	−20,619 2	−16,621 7	−3,380 5	−2,742 9	348,892 1
0,270 7	7,504 0	−33,395 7	0,100 6	−5,301 9	0,342 4
1,001 1	0,011 0	0,211 3	0,007 6	0,033 7	1,001 2

Các ước lượng tốt nhất của A và B là a = 0,342 4 và b = 1,001 2.

Ở lần lặp cuối ma trận M kích thước 9 x 9 là

$$M = \begin{bmatrix} 1,775\,5 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,181\,0 & 1,695\,9 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ -0,424\,6 & -0,543\,0 & 1,430\,6 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,181\,0 & 0,237\,8 & 0,689\,3 & 1,531\,2 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ -0,424\,6 & 0,505\,3 & 0,099\,9 & -0,724\,9 & 1,245\,3 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,374\,8 & -0,560\,7 & -0,237\,7 & -0,426\,9 & -0,030\,6 & 1,346\,5 & 0,000\,0 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ -0,230\,8 & -0,293\,1 & -0,827\,1 & 0,093\,2 & -0,582\,8 & -0,971\,1 & 0,832\,9 & 0,000\,0 & 0,000\,0 \\ 0,051\,3 & 0,048\,2 & 0,097\,1 & 0,002\,2 & 0,064\,5 & 0,092\,7 & 0,389\,9 & 0,676\,2 & 0,000\,0 \\ -10,765\,2 & -3,038\,1 & -0,381\,5 & 13,930\,2 & 30,184\,4 & 38,841\,2 & 127,115\,5 & 107,270\,6 & 110,967\,7 \end{bmatrix};$$

như vậy M_{22}(10.2.2 bước 11) là

$$M_{22} = \begin{bmatrix} 0,6762 & 0,0000 \\ 107,2706 & 110,9677 \end{bmatrix}.$$

Độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai gắn với a và b được đánh giá trong bước 11 của 10.2.2 là

$$u^2(a) = \frac{(110,9677)^2 + (107,276)^2}{(0,6762)^2 + (110,9677)^2}$$ như vậy $u(a)$ = 2,056 9;

$$u^2(b) = \frac{1}{(110,967\,7)^2},$$ như vậy $u(b) =$ 0,009 0;

$$\mathrm{cov}(a, b) = \frac{107,270\,6}{(0,676\,2)(110,967\,7)^2} = -0,012\,9.$$

Giá trị Khi-bình phương quan trắc được là χ^2_{obs} = 1,772 với ν = 5 bậc tự do, như tính được trong bước 12 ở 10.3. Vì χ^2_{obs} không vượt quá phân vị 95 % của χ^2_{ν}, tức là 11,070, nên không có lý do để nghi ngờ sự nhất quán của mô hình đường thẳng và dữ liệu.

11 Sử dụng hàm hiệu chuẩn

Việc sử dụng hàm hiệu chuẩn để dự đoán và đánh giá tiếp là độc lập với phương pháp được dùng để ước lượng tham số hàm hiệu chuẩn và đánh giá độ không đảm bảo chuẩn và hiệp phương sai kèm theo.

11.1 Dự đoán

11.1.1 Xét nội dung dưới đây được quy định, sau khi áp dụng một trong các điều từ 6 đến 10:

a) ước lượng tham số đường thẳng a và b, độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$ và hiệp phương sai cov(a,b) gắn với a và b, và

b) giá trị đo được y của Y và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(y)$.

Coi là y thu được độc lập với dữ liệu đo sử dụng để thiết lập hàm hiệu chuẩn.

11.1.2 Ước lượng x của X tương ứng với y là

$$x = \frac{y-a}{b} \qquad (15)$$

11.1.3 Độ không đảm bảo chuẩn $u(x)$ gắn với x được cho bởi

$$c(a) = -\frac{1}{b},\ c(b) = -\frac{y-a}{b^2},\ c(y) = \frac{1}{b},$$

$$u^2(x) = c^2(a)u^2(a) + c^2(b)u^2(b) + 2c(a)c(b)\mathrm{cov}(a,b) + c^2(y)u^2(y).$$

CHÚ THÍCH 1: Công thức cho $u^2(x)$ được thiết lập bằng cách sử dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008). Xấp xỉ được dựa trên tuyến tính hóa công thức (15). $c(a)$, $c(b)$ và $c(y)$ đại diện cho hệ số độ nhạy.

CHÚ THÍCH 2: Công thức ma trận có thể thuận lợi cho mục đích tính toán:

$$u^2(x) = c^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} u^2(a) & \mathrm{cov}(a,b) & 0 \\ \mathrm{cov}(b,a) & u^2(b) & 0 \\ 0 & 0 & u^2(y) \end{bmatrix} c, \qquad c = \begin{bmatrix} c(a) \\ c(b) \\ c(y) \end{bmatrix}.$$

CHÚ THÍCH 3: Trong trường hợp b = 0, tức là, đường thẳng khớp nhất là $y = a$, tương ứng với hàm hiệu chuẩn không chấp nhận được, thì không thể tiến hành dự đoán.

CHÚ THÍCH 4: Giá trị sử dụng của độ không đảm bảo chuẩn $u(x)$ phụ thuộc vào sự thỏa mãn của kiểm nghiệm Khi-bình phương liên quan được nêu trong các điều từ 6 đến 10.

VÍ DỤ 1: Xét ví dụ số về bình phương tối thiểu có trọng số (WLS) có *trọng số đã biết bằng nhau* mô tả trong Điều 6, tham số đường thẳng khớp nhất và độ không đảm bảo chuẩn, hiệp phương sai kèm theo là

$$a = 1,867, \quad b = 1,757, \quad u(a) = 0,465, \quad u(b) = 0,120, \quad \mathrm{cov}(a,b) = -0,050.$$

Lấy $y = 10,5$ là giá trị đo được bổ sung của Y và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(y) = 0,5$.

Từ 11.1.2, ước lượng giá trị x của X tương ứng với y là

$$x = (10,5 - 1,867)/1,757 = 4,913.$$

Sử dụng 11.1.3, độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(x)$ được cho bởi

$c(a) = -1/1,867 = -0,569,$

$c(b) = -(10,5 - 1,867)/(1,757)^2 = -2,796,$

$c(y) = 1/1,757 = 0,569,$

$u^2(x) = (-0,569)^2(0,217) + (-2,796)^2(0,014) + (2)(-0,569)(-2,796)(-0,050) + (-0,569)^2(0,5)^2 = 0,104$, như vậy $u(x) = 0,322$.

VÍ DỤ 2: Xét ví dụ số về bình phương tối thiểu có trọng số (WLS) có *trọng số không bằng nhau đã biết* mô tả ở Điều 6, tham số đường thẳng khớp nhất và độ không đảm bảo chuẩn, hiệp phương sai kèm theo là

$a = 0,885, \quad b = 2,057, \quad u(a) = 0,530, \quad u(b) = 0,178, \quad \mathrm{cov}(a,b) = -0,082.$

Lấy $y = 10,5$ là giá trị đo được bổ sung của Y và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(y) = 1,0$.

Từ 11.1.2, ước lượng giá trị x của X tương ứng với y là

$$x = (10,5 - 0,885)/2,057 = 4,674.$$

Sử dụng 11.1.3, độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(x)$ được cho bởi

$c(a) = -1/0,885 = -0,486,$

$c(b) = -(10,5 - 0,885)/(2,057)^2 = -2,272,$

$c(y) = 1/2,057 = 0,486,$

$u^2(x) = (-0,486)^2(0,281) + (-2,272)^2(0,032) + (2)(-0,486)(-2,272)(-0,082) + (-0,486)^2(1,0)^2 = 0,284$, như vậy $u(x) = 0,533$.

Trong ví dụ này và Ví dụ 1 ở 11.1, ảnh hưởng của các độ không đảm bảo khác nhau gắn với giá trị của y có thể được thấy trong độ không đảm bảo tương ứng gắn với giá trị tương ứng của x.

11.2 Đánh giá tiếp

Xét nội dung dưới đây được quy định, sau khi áp dụng một trong các điều từ 6 đến 10:

a) ước lượng tham số đường thẳng a và b, độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$ và hiệp phương sai $\mathrm{cov}(a,b)$ gắn với a và b , và,

b) giá trị đo được x của X và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(x)$.

Coi là x thu được độc lập với dữ liệu đo sử dụng để thiết lập hàm hiệu chuẩn.

11.2.1 Ước lượng y của Y tương ứng với x là

$$y = a + bx \qquad (16)$$

11.2.2 Độ không đảm bảo chuẩn $u(y)$ gắn với y được cho bởi

$$c(a) = 1, \quad c(b) = x, \quad c(x) = b,$$

$$u^2(y) = c^2(a)u^2(a) + c^2(b)u^2(b) + 2c(a)c(b)\mathrm{cov}(a,b) + c^2(x)u^2(x).$$

CHÚ THÍCH 1: Công thức cho $u^2(y)$ được thiết lập bằng cách sử dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008). Xấp xỉ được dựa trên tuyến tính hóa công thức (16). $c(a)$, $c(b)$ và $c(y)$ đại diện cho hệ số độ nhạy.

CHÚ THÍCH 2: Công thức ma trận có thể thuận lợi cho mục đích tính toán:

$$u^2(y) = c^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} u^2(a) & \mathrm{cov}(a,b) & 0 \\ \mathrm{cov}(b,a) & u^2(b) & 0 \\ 0 & 0 & u^2(x) \end{bmatrix} c, \qquad c = \begin{bmatrix} c(a) \\ c(b) \\ c(x) \end{bmatrix}.$$

CHÚ THÍCH 3: Giá trị sử dụng của độ không đảm bảo chuẩn $u(y)$ phụ thuộc vào sự thỏa mãn của kiểm nghiệm Khi-bình phương liên quan được nêu trong các điều từ 6 đến 10.

VÍ DỤ: Xét ví dụ số về bình phương tối thiểu có trọng số (WLS) có *trọng số đã biết bằng nhau* mô tả trong Điều 6, tham số đường thẳng khớp nhất và độ không đảm bảo chuẩn, hiệp phương sai kèm theo là

$$a = 1{,}867, \quad b = 1{,}757, \quad u(a) = 0{,}465, \quad u(b) = 0{,}120, \quad \mathrm{cov}(a,b) = -0{,}050.$$

Lấy x = 3,5 là giá trị đo được bổ sung của X và độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(x)$ = 0,2, giả định rằng cov(x, a) = cov(x, b) = 0, tức là, không có mối tương quan gắn với x và a, x và b.

Từ 11.2.1, ước lượng giá trị y của Y tương ứng với x là

$$y = 1{,}867 + (1{,}757)(3{,}5) = 8{,}017.$$

Sử dụng 11.2.2, độ không đảm bảo chuẩn kèm theo $u(y)$ được cho bởi

$$u^2(y) = 0{,}217 + (3{,}5)^2(0{,}014) + (2)(3{,}5)(-0{,}050) + (1{,}757)^2(0{,}2)^2 = 0{,}165,$$

như vậy $u(y)$ = 0,406.

Phụ lục A
(tham khảo)

Phép tính ma trận

A.1 Khái quát

Phụ lục này mô tả các phép tính ma trận được sử dụng trong tiêu chuẩn này.

A.2 Phép tính cơ bản

Trong các phép tính sau đây, A là ma trận kích thước m x n với phần tử $A(i, j) = a_{ij}$ trong hàng thứ i và cột thứ j, B là ma trận kích thước n x k, C là ma trận (vuông) kích thước m x m và d là véc tơ kích thước n x 1 với phần tử thứ j d_j.

A.2.1 Phép nhân ma trận-véc tơ

Tích ma trận-véc tơ Ad là véc tơ e kích thước m x 1 với phần tử thứ i e_i xác định bởi

$$e_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} d_j = a_{i1} d_1 + a_{i2} d_2 + \ldots + a_{in} d_n.$$

A.2.2 Phép nhân ma trận-ma trận

Tích ma trận AB là ma trận kích thước m x k có cột thứ j là tích của A và cột thứ j của B.

A.2.3 Chuyển vị ma trận

Chuyển vị A^T của ma trận A là ma trận kích thước n x m với phần tử $A(j, i) = a_{ij}$ trong hàng thứ j và cột thứ i.

A.2.4 Ma trận đơn vị

Ma trận đơn vị bậc m là ma trận I kích thước m x m sao cho $I(j, j) = 1, j = 1,\ldots, m$, và tất cả các phần tử khác bằng 0.

A.2.5 Nghịch đảo ma trận vuông

Nghịch đảo của C, nếu có, được ký hiệu là C^{-1} và là ma trận kích thước m x m sao cho

$$CC^{-1} = C^{-1} C = I.$$

Chuyển vị của C^{-1} bằng nghịch đảo của C^T và được ký hiệu là C^{-T}.

A.3 Các định nghĩa cơ bản

Trong các định nghĩa sau đây, C là ma trận (vuông) kích thước m x m với phần tử $C(i, j) = c_{ij}$ trong hàng thứ i và cột thứ j.

A.3.1 Ma trận đối xứng

Ma trận C là đối xứng nếu $c_{ij} = c_{ij}$, $i = 1,\ldots, m$, $j = 1,\ldots, m$, tức là, $C = C^T$.

A.3.2 Ma trận khả nghịch

Ma trận C là khả nghịch nếu tồn tại nghịch đảo C^{-1} của nó (xem A.2.5).

A.3.3 Ma trận tam giác dưới và tam giác trên

Ma trận C là ma trận tam giác dưới nếu $c_{ij} = 0$, $i < j$, và ma trận tam giác trên nếu $c_{ij} = 0$, $i > j$.

A.3.4 Ma trận trực giao

Ma trận C là trực giao nếu $C^TC = I$.

A.4 Thừa số Cholesky

Thừa số Cholesky của ma trận hoàn toàn dương đối xứng U kích thước m x m là ma trận tam giác dưới L kích thước m x m sao cho $U = LL^T$ [10].

A.4.1 Thuật toán thừa số Cholesky

A.4.1.1 Thuật toán sau đây tính ma trận tam giác dưới L sao cho $U = LL^T$.

Initialization

```
    for k = 1 : m
        for j = k : m
            L(j,k): = U(j, k)
        end
    end
  for k = 2 : m
     for j = 1 : k – 1
         L(j,k): = 0
     end
  end
```

Factorization

```
    for k = 1 : m
        L(k,k) := sqrt(L(k,k))
        for j = k + 1 : m
            L(j,k): = L(j, k)/L(k, k)
        end
        for j = k + 1 : m
            for l = j : m
                L(l, j): = L(l, j) - L(l, k)L(j, k)
            end
        end
    end
```

CHÚ THÍCH: Để ghi đè các phần tử tam giác dưới $U(i, j)$, $i \geq j$ của U với thừa số Cholesky của nó, chỉ thực hiện các bước trong giai đoạn *Thừa số hóa* của thuật toán trong A.4.1.1, sử dụng U thay cho L.

A.4.1.2 Các tính toán trong A.4.1.1 có thể được tổ chức lại để liên quan nhiều phép tính véc tơ-véc tơ hơn nhằm cải thiện tốc độ thực hiện trong ngôn ngữ máy tính hỗ trợ các phép tính véc tơ và mảng. Ví dụ

Initialization

```
for j = 1 : m
    L(j, 1 : j): = U(j, 1 : j)
end
for j = 1 : m - 1
  L(j, j + 1 : m): = 0
end
```

Factorization

```
for j = 1 : m
    if j > 1
    L(j : m,j): = L(j : m,j) - L(j : m,1 : j - 1) L(j, 1: j - 1)^T
    end
    L(j : m,j): = L(j : m,j)/ sqrt(L(j,j))
end
```

CHÚ THÍCH: Để ghi đè các phần tử tam giác dưới $U(i, j)$, $i \geq j$ của U với thừa số Cholesky của nó, chỉ thực hiện các bước trong giai đoạn *Thừa số hóa* của thuật toán trong A.4.1.2, sử dụng U thay cho L.

A.4.2 Giải thích phép thừa số hóa Cholesky của ma trận hiệp phương sai

A.4.2.1 Giả định E_i, i = 1,...,m là m biến ngẫu nhiên độc lập, mỗi biến có kỳ vọng bằng 0 và phương sai bằng 1, lấy e_i là thể hiện của E_i. Lấy

$$y_1 = l_{11}e_1,$$

$$y_2 = l_{21}e_1 + l_{22}e_2.$$

Khi đó, $u^2(y_1) = l_{11}^2$ và $u^2(y_2) = l_{21}^2 + l_{22}^2$. Sự phụ thuộc chung của y_1 và y_2 vào e_1 nghĩa là y_1 và y_2 có mối tương quan, với hiệp phương sai cov(y_1, y_2) = $l_{11}l_{21}$. Tiếp tục, giả định

$$y_3 = l_{31}e_1 + l_{32}e_2 + l_{33}e_3,$$

$$\vdots$$

$$y_m = l_{m1}e_1 + l_{m2}e_2 + \ldots + l_{mm}e_m.$$

A.4.2.2 Theo thuật ngữ ma trận, $y = Le$, với tam giác dưới L. Sự phụ thuộc chung của y_1 và y_3 vào e_1 nghĩa là có mối tương quan gắn với y_1 và y_3. Tương tự, sự phụ thuộc chung của y_2 và y_3 vào e_1 và e_2 nghĩa là có mối tương quan gắn với y_2 và y_3 , và cứ tiếp như vậy.

A.4.2.3 Cho trước ma trận hiệp phương sai U gắn với dữ liệu y_i, thừa số Cholesky $U = LL^T$ tính các hệ số l_{ij} sao cho ma trận hiệp phương sai có thể giải thích bằng cách giả định rằng y_i được định nghĩa trong A.4.2.1 như thể hiện của các tổ hợp tuyến tính xác định bởi l_{ij} của các biến ngẫu nhiên độc lập E_i. Trên thực tế, các ma trận hiệp phương sai thường được xác định về các thừa số $U = BB^T$ và U đã cho có vô cùng nhiều thừa số B có thể sử dụng để xây dựng U. Thừa số Cholesky, trong đó các tổ hợp tuyến tính được đại diện bởi ma trận tam giác dưới, là duy nhất đến dấu trị số của các cột của L.

A.4.3 Giải hệ tam giác dưới

A.4.3.1 Nếu L là ma trận tam giác dưới kích thước m x m sao cho $L(j, j) \neq 0$, $j = 1,\dots,m$ và x là véc tơ kích thước m x 1, thuật toán sau đây tính véc tơ y, trong đó y sao cho $Ly = x$, tức là, $y = L^{-1}x$.

Initialization

```
for j = 1 : m
    y(j): = x(j)
end
```

Solution

```
y(1): = y(1)/L(1, 1)
for j = 2 : m
    for k = 1 : j – 1
        y(j): = y(j) – L(j, k) y(k)
    end
    y(j): = y(j) – L(j,j)
end
```

CHÚ THÍCH: Để ghi đè véc tơ x với lời giải y, chỉ thực hiện các bước trong giai đoạn *Giải* của thuật toán trong A.4.3.1, sử dụng x thay cho y.

A.4.3.2 Thuật toán trong A.4.3.1 có thể áp dụng để giải phương trình ma trận $LY = X$ bằng cách áp dụng liên tiếp cho từng cột của X. Về toán học, lời giải được cho bởi $Y = L^{-1}X$.

A.4.4 Giải hệ tam giác trên

A.4.4.1 Phép giải hệ tam giác trên có thể được xác định theo chuyển vị ma trận tam giác dưới. Nếu L là ma trận tam giác dưới kích thước m x m sao cho $L(j, j) \neq 0$, $j = 1,\dots,m$ và x là véc tơ kích thước m x 1, thuật toán sau đây tính véc tơ y, trong đó y sao cho $L^T y = x$, tức là, $y = L^{-T}x$.

Initialization

```
for j = 1 : m
    y(j): = x(j)
end
```

Solution

$y(m) := y(m)/L(m, m)$

for $j = j = m - 1: -1 : 1$

for $k = j + 1 : m$

$y(j) := y(j) - L(k, j)\, y(k)$

end

$y(j) := y(j) - L(j, j)$

end

CHÚ THÍCH: Để ghi đè véc tơ x với lời giải y, chỉ thực hiện các bước trong giai đoạn *Giải* của thuật toán trong A.4.4.1, sử dụng x thay cho y.

A.4.4.2 Thuật toán trong A.4.4.1 có thể áp dụng để giải phương trình ma trận $L^{T}Y = X$ bằng cách áp dụng liên tiếp cho từng cột của X. Về toán học, lời giải được đưa ra bởi $Y = L^{-1}X$.

A.5 Thừa số trực giao

Các ma trận trực giao là tổ hợp các phép quay và phép đối xứng và có tính chất nhân trước véc tơ với ma trận trực giao mà không làm thay đổi độ lớn của véc tơ đó (căn bậc hai tổng các bình phương các phần tử của nó). Các cột của ma trận trực giao có thể được coi như xác định hệ trục vuông góc. Điều quan trọng của kỹ thuật thừa số trực giao là nó cho phép giải các phương trình ma trận theo cách số học ổn định. Các thuật toán để tính thừa số trực giao được mô tả trong các tài liệu tham khảo [1, 10, 20].

A.5.1 Thừa số QR

Thừa số QR của ma trận A kích thước $m \times n$, với $m \geq n$, có thể được viết là

$$A = QR = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R_1,$$

trong đó $Q = [Q_1\ Q_2]$ là ma trận trực giao kích thước $m \times m$, Q_1 là ma trận bao gồm n cột đầu tiên của Q, với $Q_1^{T} Q_1 = I$, và R_1 là ma trận tam giác trên kích thước $n \times n$.

CHÚ THÍCH: Cũng có thể thu được thừa số QR của ma trận A kích thước $m \times n$, với $m < n$. Trong tiêu chuẩn này, vì tất cả các ma trận mà tính toán thừa số QR được yêu cầu có $m \geq n$, nên thừa số không được cung cấp.

A.5.2 Thừa số RQ

A.5.2.1 Thừa số RQ của ma trận B kích thước $m \times n$, với $m \geq n$ có thể được viết là

$$B = TZ = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} Z,$$

trong đó Z là ma trận trực giao T_2 là ma trận tam giác trên.

A.5.2.2 Thừa số RQ của ma trận B kích thước $m \times n$, với $m < n$ có thể được viết là

$$B = TZ = \begin{bmatrix} 0 & T_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{bmatrix} = T_2 Z_2,$$

trong đó Z là ma trận trực giao T_2 là ma trận tam giác trên.

Phụ lục B

(tham khảo)

Áp dụng thuật toán Gauss-Newton cho hồi quy khoảng cách tổng quát

B.1 Phụ lục này rút ra các thuật toán trong 7.2.1 và 8.2.1 bằng cách sử dụng thuật toán Gauss-Newton.

B.2 Các thuật toán trong 7.2.1 và 8.2.1 là ứng dụng cụ thể của thuật toán Gauss-Newton lặp [10] để tối thiểu hóa tổng các bình phương của hàm phi tuyến:

$$F(A)=\sum_{i=1}^{m} f_i^2(A), \qquad A\,(A_1, \ldots, A_n)^T, \qquad m \geq n.$$

B.3 Lấy $\tilde{a}$ là xấp xỉ của các tham số giải a và

$$f=\begin{bmatrix} f_1(A) \\ \vdots \\ f_m(A) \end{bmatrix} \quad \text{và} \quad J=\begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial A_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_1}{\partial A_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial f_m}{\partial A_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_m}{\partial A_n} \end{bmatrix}$$

tương ứng là véc tơ kích thước m x 1 của các giá trị hàm số và ma trận Jacobi kích thước m x n của đạo hàm riêng bậc một đối với các tham số, đánh giá tại $\tilde{a}$ xấp xỉ với các tham số.

B.4 Lấy p giải

$$J^T J p = -J^T f. \tag{B.1}$$

Khi đó, ước lượng mới của các tham số giải được cho bởi $\tilde{a} := \tilde{a} + p$.

B.5 Đối với các thuật toán trong 7.2.1 và 8.2.1, $a = (A, B)^T$ và hàm $f_i(A)$ là thước đo khoảng cách tổng quát tính từ điểm dữ liệu thứ $i(x_i, y_i)$ đến đường $y = A + Bx$.

B.6 Lấy U_i là ma trận hiệp phương sai gắn với điểm dữ liệu thứ i:

$$U_i=\begin{bmatrix} u^2(x_i) & \operatorname{cov}(x_i, y_i) \\ \operatorname{cov}(y_i, x_i) & u^2(y_i) \end{bmatrix},$$

và lấy $x_i^* \equiv x_i^*(A, B)$, gọi là điểm chân thứ i, giải

$$\min_x \quad d_i^2(x, A, B)=\begin{bmatrix} x_i - x \\ y_i - A - Bx \end{bmatrix}^T U_i^{-1} \begin{bmatrix} x_i - x \\ y_i - A - Bx \end{bmatrix}, \tag{B.2}$$

hàm của A và B.

B.7 Nếu $f_i^2(A, B)$ được xác định bằng

$$f_i^2(A,B) = d_i^2(x_i^*(A,B),A,B),$$

tức là, $d_i^2(x,A,B)$ đánh giá tại giải x_i^*, thì khi đó các giá trị của A và B làm tối thiểu

$$F(A,B)=\sum_{i=1}^{m} f_i^2(A,B)$$

xác định đường hồi quy khoảng cách tổng quát khớp nhất. Áp dụng thuật toán Gauss-Newton đòi hỏi xác định đạo hàm riêng bậc một của $f_i(A, B)$ đối với A và B để hình thành ma trận Jacobi **J**.

B.8 Lấy $n = (-B,1)^T$ là véc tơ trực giao với đường $y = A + Bx$ và giả định rằng x_i^* là phép giải của vấn đề điểm chân (B.2). Đặt $x_i = (x_i, y_i)^T$, $x_i^* = (x_i^*, A + Bx_i^*)^T$ và

$$t_i = n^T U_i n, \tag{B.3}$$

khi đó, biểu thị giá trị hàm và đạo hàm đối với U_i, A, B, x_i, y_i và x_i^*,

$$f_i(A,B) = t_i^{-1/2} n^T (x_i - x_i^*), \tag{B.4}$$

và

$$\frac{\partial f_i}{\partial A} = t_i^{-1/2} n^T \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial f_i}{\partial B} = -t_i^{-1/2} n^T \begin{bmatrix} 0 \\ x_i^* \end{bmatrix}, \tag{B.5}$$

B.9 Giải x_i^* của vấn đề điểm chân (B.2) được cho bởi

$$\begin{bmatrix} p_i \\ q_i \end{bmatrix} = U_i \begin{bmatrix} -B \\ 1 \end{bmatrix}, \quad x_i^* = \frac{-q_i x_i + p_i(y_i - A)}{-q_i + p_i B}. \tag{B.6}$$

CHÚ THÍCH: Biểu thức (B.3), (B.4), (B.5) và (B.6) được xác định đối với U_i chứ không phải nghịch đảo của nó U_i^{-1},. Không có yêu cầu U_i khả nghịch nhưng $n^T U_i n$ phải khác không.

B.10 Các thuật toán trong 7.2.1 và 8.2.1 áp dụng thuật toán Gauss-Newton sử dụng các biểu thức rõ ràng cho f_i(A,B), $\partial f_i/\partial$A và $\partial f_i/\partial$B. Giải cho bước mới p trong biểu thức (B.1) được hình thành như vấn đề xác định đường thẳng khớp nhất bình phương tối thiểu có trọng số (xem 6.2.1 các bước từ 1 đến 5) đối với dữ liệu chuyển đổi rút ra từ dữ liệu đo (x_i, y_i), ma trận hiệp phương sai kèm theo U_i và các gần đúng hiện tại với A và B.

Phụ lục C

(tham khảo)

Cách tiếp cận thừa số trực giao để giải quyết bài toán Gauss-Markove tổng quát

C.1 Khái quát

Thuật toán lặp mô tả trong 10.2.2 giả định rằng ma trận hiệp phương sai U kích thước $2m$ x $2m$ là xác định dương và do đó là khả nghịch. Đặc biệt, tính khả nghịch đòi hỏi mọi $u(x_i) > 0$ và $u(y_i) > 0$. Trong phụ lục này thuật toán tổng quát được mô tả là phù hợp cho mọi ma trận hiệp phương sai U (bán xác định dương đối xứng). Tất cả những gì được yêu cầu là ma trận hiệp phương sai có thể thừa số hóa là $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$, trong đó $\boldsymbol{B}$ là ma trận kích thước $2m$ x p ($p \geq m$). Thông thường, ma trận hiệp phương sai được bắt nguồn từ thừa số hóa như vậy. Nếu $\boldsymbol{U}$ là khả nghịch thì $\boldsymbol{B}$ có thể là thừa số Cholesky của nó. Thuật toán tiến hành tương tự như mô tả trong 10.2.2 và yêu cầu tính toán số dư f và ma trận Jacobi J, nhưng số gia δt được xác định bằng cách sử dụng hai thừa số trực giao. Về toán học, δt tối thiểu hóa

$$c^T c = \sum_{i=1}^{p} c_i^2 \qquad \text{chịu các ràng buộc } f = -J\delta t + Bc.$$

C.2 Ước lượng tham số hiệu chuẩn và độ không đảm bảo chuẩn, hiệp phương sai kèm theo

Các ước lượng a và b được tính như trong các bước từ 1 đến 9 dưới đây; độ không đảm bảo chuẩn u(a) và u(b) được đánh giá trong bước 10:

1 Thu được các xấp xỉ ban đầu $\tilde{t} = \left(\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_m, \tilde{a}, \tilde{b}\right)^T$ cho tham số;

2 Tính véc tơ kích thước $2m$ x 1,

$$f = \begin{bmatrix} x_1 - \tilde{x}_1 \\ \vdots \\ x_m - \tilde{x}_m \\ y_1 - \left(\tilde{a} + \tilde{b}\tilde{x}_1\right) \\ \vdots \\ y_m - \left(\tilde{a} + \tilde{b}\tilde{x}_m\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x - \tilde{x} \\ y - \tilde{a}1 - \tilde{b}\tilde{x} \end{bmatrix}.$$

và ma trận (Jacobi) kích thước $2m$ x (m + 2),

$$J=\begin{bmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -\tilde{b} & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 & -\tilde{x}_1 \\ 0 & -\tilde{b} & \cdots & 0 & 0 & -1 & -\tilde{x}_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\tilde{b} & 0 & -1 & -\tilde{x}_{m-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\tilde{b} & -1 & -\tilde{x}_m \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -I & 0 & 0 \\ -\tilde{b}I & -1 & -\tilde{x} \end{bmatrix}$$

trong đó $\tilde{x}=(\tilde{x}_1,\ldots,\tilde{x}_m)^T$ được trích từ ước lượng $\tilde{t}$ hiện tại của véc tơ tham số;

3 Xác định thừa số QR của J:

$$J=Q\begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

trong đó Q là ma trận trực giao, kích thước $2m$ x 2 m và R_1 là ma trận tam giác trên kích thước (m + 2) x (m + 2); xem A.5.1;

4 Hình thành tích ma trận Q^TB và xác định thừa số RQ của nó

$$Q^TB = TZ,$$

trong đó T là ma trận, kích thước $2m$ x p và Z là ma trận trực giao kích thước p x p; xem A.5.2;

5 Đặt $\tilde{f}=Q^Tf$ và phân vùng $\tilde{f}$ và T:

$$\tilde{f}=\begin{bmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \end{bmatrix}, \qquad T=\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix},$$

trong đó $\tilde{f}_1$ là véc tơ kích thước (m + 2) x 1, $\tilde{f}_2$ là véc tơ kích thước (m – 2) x 1, T_{11} là ma trận kích thước (m + 2) x (p – m + 2), T_{12} là ma trận kích thước (m + 2) x (m - 2) và T_{22} là ma trận tam giác trên kích thước (m – 2) x m –2);

6 Giải hệ tam giác trên $T_{22}\tilde{e}_2=\tilde{f}_2$ để xác định véc tơ $\tilde{e}_2=(\tilde{e}_{2,1},\ldots,\tilde{e}_{2,m-2})^T$ kích thước (m – 2) x 1; xem A.4.4;

7 Giải hệ tam tác trên $R_1\delta t = T_{12}\tilde{e}_2=\tilde{f}_1$ để xác định số gia δt; xem A.4.4;

8 Cập nhật các xấp xỉ hiện tại cho các tham số: $\tilde{t} := \tilde{t} + \delta t$;

9 Lặp lại các bước từ 2 đến 8 cho đến khi đạt được sự hội tụ. Đặt $a=\tilde{a}$ và $b=\tilde{b}$ (các thành phần m + 1 và m + 2 của $\tilde{t}$);

10 Lấy R_a là ma trận dưới bên phải kích thước 2 x 2 của R_1 và T_a là ma trận dưới bên phải kích thước 2 x 2 của T_{11}. Giải hệ tam giác trên

$$R_aK_a = T_a,$$

đối với ma trận tam giác trên K_a kích thước 2 x 2 (xem A.4.4) và đặt $U_a = K_a K_a^T$. Khi đó

$$u^2(a) = U_a(1,1),\ u^2(b) = U_a(2,2) \text{ và } \operatorname{cov}(a,b) = U_a(1,2).$$

CHÚ THÍCH 1: Cách tiếp cận mô tả trong C.2 đại diện cho cách giải tổng quát nhất để xác định hàm hiệu chuẩn tuyến tính sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu. Tất cả các cách tiếp cận khác mô tả trong tiêu chuẩn này có thể được giải như trường hợp đặc biệt.

CHÚ THÍCH 2: Các bước 1, 2, 8 và 9 trong C.2 tương ứng giống với các bước 1, 2, 9 và 10 trong 10.2.2.

C.3 Xác nhận giá trị sử dụng của mô hình

Nếu $m > 2$ thì giá trị sử dụng của mô hình có thể kiểm nghiệm một phần bằng cách sử dụng thành phần véc tơ $\tilde{e}_2$ (tiếp theo C.2):

11 Thiết lập giá trị Khi-bình phương quan trắc được $\chi^2_{obs} = \sum_{i=1}^{m-2} \tilde{e}^2_{2,i}$ và bậc tự do $\nu = m - 2$;

12 Kiểm tra xem χ^2_{obs} có vượt quá phân vị 95 % của χ^2_ν không, và xem liệu có bác bỏ mô hình đường thẳng hay không.

CHÚ THÍCH: Kiểm nghiệm Khi-bình phương dựa trên giả định là d_i và e_i trong mô hình (13) là các thể hiện của biến ngẫu nhiên đặc trưng bởi phân bố chuẩn nhiều chiều và dựa trên xấp xỉ bậc một. Với giả định này, véc tơ $\tilde{e}_2$ kích thước $(m-2) \times 1$ gắn với phân bố Gauss nhiều chiều có ma trận hiệp phương sai bằng với ma trận đơn vị kích thước $(m-2) \times (m-2)$ sao cho χ^2_{obs} gắn với phân bố χ^2 với $m-2$ bậc tự do.

VÍ DỤ 1: Cách tiếp cận thừa số QR có thể áp dụng cho ví dụ số mô tả trong Điều 10.

Ma trận hiệp phương sai U_x sinh ra dưới dạng thừa số (xem D.4) là

$$U_x = B_x B_x^T,$$

trong đó

$$B_x = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 1.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.0 & 0.0 & 1.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.5 & 0.5 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}.$$

Ma trận hiệp phương sai $U_y = B_y B_y^T$ cũng có dạng thừa số với

$$B_y = \begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 2.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 2.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 2.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 2.0 & 0.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 2.0 & 0.0 & 1.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 2.0 & 1.0 \end{bmatrix}.$$

Ma trận hiệp phương sai U hoàn chỉnh kích thước 14 x 14 được thừa số hóa thành $U = BB^T$, trong đó B là ma trận kích thước 14 x 18

$$B = \begin{bmatrix} B_x & 0 \\ 0 & B_y \end{bmatrix}.$$

Đối với ví dụ này, thuật toán trong C.2 tương đương về toán học với thuật toán trong 10.2.2 và hai cách tiếp cận đều cho kết quả số rất giống nhau.

VÍ DỤ 2: Bảng C.1 cho 7 điểm dữ liệu đo được (x_i, y_i) thu được bằng cách sử dụng mô hình đo mô tả trong D.2 và D.5.

Ma trận hiệp phương sai gắn với y_i được rút ra bằng cách sử dụng mô hình (D.1) với u_S = 2,0 và u_R = 1,0 và giống như trong Ví dụ 1 Phụ lục C.

Dữ liệu x_i và ma trận hiệp phương sai kèm theo được rút ra bằng cách sử dụng mô hình đo (D.3) với z_1 = 50, z_2 = 100, z_3 = 200, $u(z_1)$ = 0,5 và $u(z_2)$ = $u(z_3)$ = 1,0, sao cho

$$U_x = B_x B_x^{\mathrm{T}},$$

trong đó

$$B_x = \begin{bmatrix} 0{,}5 & 0{,}0 & 0{,}0 \\ 0{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 \\ 0{,}5 & 1{,}0 & 0{,}0 \\ 0{,}0 & 0{,}0 & 1{,}0 \\ 0{,}5 & 0{,}0 & 1{,}0 \\ 0{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 \\ 0{,}5 & 1{,}0 & 1{,}0 \end{bmatrix}.$$

Ma trận hiệp phương sai hoàn chỉnh U kích thước 14 x 14 được thừa số hóa thành $U = BB^{\mathrm{T}}$, trong đó B là ma trận kích thước 14 x 11

$$B = \begin{bmatrix} B_x & 0 \\ 0 & B_y \end{bmatrix}.$$

Đối với ví dụ này, không thể áp dụng thuật toán trong 10.2.2 vì U không xác định dương. Thay vào đó có thể sử dụng thuật toán mô tả trong C.2.

Bảng C.2 đưa ra véc tơ ban đầu $\tilde{t}_0$, các hiệu chính $\delta\tilde{t}_k$= đối với lần lặp thứ k, k = 1,...,5 và ước lượng cuối $\tilde{t} = \tilde{t}_5$.

Bảng C.1 – Dữ liệu thể hiện 7 điểm đo, x_i và y_i có ma trận hiệp phương sai kèm theo

x_i	y_i
50,5	47,1
99,7	98,4
150,2	153,7
199,5	194,0
249,9	251,9
299,2	297,5
349,7	349,0

Bảng C.2 – Thay đổi véc tơ tham số $\tilde{t}$

$\tilde{t}_0$	$\delta t_1 \times 10^{-2}$	$\delta t_2 \times 10^{-4}$	$\delta t_3 \times 10^{-6}$	$\delta t_4 \times 10^{-8}$	$\delta t_5 \times 10^{-10}$	$\tilde{t}_5$
50.500 0	30.822 9	3.187 4	23.295 7	8.112 4	16.423 1	50.808 6
99.700 0	55,831 3	−13.836 5	26.113 6	−0.206 3	15.677 0	100,257 0
150.200 0	86.654 2	−10.649 1	49.409 3	7.906 1	32.100 2	151,065 5
199.500 0	−59,071 1	−48.597 6	−49.584 9	−44.790 4	−43.047 0	198.904 4
249.900 0	−28,248 2	−45.410 2	−26.289 1	−36.678 0	−26.623 7	249.613 0
299.200 0	−3.239 8	−62.434 1	−23.471 3	−44.996 7	−27.369 8	299.161 3
349.700 0	27.583 1	−59.246 7	−0,175 5	−36.884 3	−10.946 8	349.969 9
−1.852 8	−50.620 3	−140.085 6	−63.931 6	−100.943 2	−68.134 5	−2.373 1
1,004 2	0,173 8	0.857 1	0.321 7	0.610 8	0.372 2	1.006 0

Phụ lục D

(tham khảo)

Quy định về độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với x-giá trị và y-giá trị đo được

D.1 Khái quát

Phụ lục này chỉ ra cách thức để thu được độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với giá trị đo đáp ứng và kích thích đo được. Cách tiếp cận dựa trên việc sử dụng mô hình đo gồm các quá trình làm cơ sở cho việc xác định dữ liệu đáp ứng và kích thích, và áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008). Các ví dụ minh họa được sử dụng cho mục đích này.

D.2 Dữ liệu đáp ứng 1

D.2.1 Khái quát

D.2.1.1 Giả định đại lượng Y đại diện đáp ứng phương tiện đo có thể được biểu thị bằng mô hình đo

$$Y = Y_0 + E, \tag{D.1}$$

trong đó Y_0 là đại lượng thể hiện bởi đáp ứng chỉ thị và E là đại lượng đại diện cho ảnh hưởng hệ thống. Giả định rằng hiểu biết về Y_0 được mã hóa bằng phân bố có độ lệch chuẩn u_R. Phân bố này thường dựa trên phân tích số lượng chỉ thị lặp lại của Y. Y_0 được ước lượng bằng trung bình của các chỉ thị này và u_R là độ không đảm bảo chuẩn gắn với ước lượng này. Giả định rằng hiểu biết về E sao cho E có kỳ vọng 0 (tức là, mọi hiệu chính cần thiết đều được áp dụng) và phương sai u_S^2 (thu được từ hiểu biết phụ thuộc vào tính chất cụ thể của phương tiện đo).

D.2.1.2 Tiếp sau biểu thức (D.1), bằng việc áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với giá trị đo được y_i của Y được cho bởi

$$u^2(y_i) = u_S^2 + u_R^2$$

Ngoài ra, hiệp phương sai gắn với giá trị đo được y_i và y_j của Y là

$$\mathrm{cov}(y_i, y_j) = u_S^2$$

D.2.1.3 Do đó, ma trận hiệp phương sai trong trường hợp này là

$$U_y = \begin{bmatrix} u_S^2 + u_R^2 & u_S^2 & \dots & u_S^2 \\ u_S^2 & u_S^2 + u_R^2 & \dots & u_S^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots \\ u_S^2 & u_S^2 & \dots & u_S^2 + u_R^2 \end{bmatrix}.$$

D.2.2 Mô hình đo dùng cho độ không đảm bảo và hiệp phương sai gắn với y_i

D.2.2.1 Dữ liệu sử dụng trong ví dụ ở Điều 9 được rút ra từ hệ đo trong đó hai nhóm phép đo được thực hiện. Mỗi nhóm phép đo chịu một ảnh hưởng hệ thống khác nhau với hai ảnh hưởng không tương quan, tức là,

$$Y_i = \begin{cases} Y_{0,i} + E_1, & i = 1,\ldots,m_1(m, \\ Y_{0,i} + E_2, & i = m_1 + 1,\ldots,m, \end{cases}$$

trong đó $Y_{0,i}$ là đại lượng thể hiện bởi đáp ứng chỉ thị thứ i và các đại lượng E_1 và E_2 đại diện cho ảnh hưởng hệ thống. Giả định rằng hiểu biết về $Y_{0,i}$ sao cho $Y_{0,i}$ có phương sai u_R^2 và hiểu biết về E_k sao cho E_k có kỳ vọng bằng 0 và phương sai $u_{S,k}^2$, đối với k = 1, 2.

D.2.2.2 Độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với giá trị đo được y_i của Y_i được cho bởi

$$u^2(y_i) = \begin{cases} u_R^2 + u_{S,1}^2, & i = 1,\ldots,m_1 \\ u_R^2 + u_{S,2}^2, & i = m_1 + 1,\ldots,m. \end{cases}$$

Hiệp phương sai gắn với giá trị đo được y_i và y_j là

$$\text{cov}(y_i, y_j) = \begin{cases} u_{S,1}^2, & 1 \le i \le m_1, 1 \le j \le m_1, \\ u_{S,2}^2, & m_1 + 1 \le i \le m, m_1 + 1 \le j \le m, \\ 0 & \text{nếu khác} \end{cases}$$

D.2.2.3 Ma trận hiệp phương sai trong trường hợp này là

$$U_y = \begin{bmatrix} u_{S,1}^2 + u_R^2 & \cdots & u_{S,1}^2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{S,1}^2 & \cdots & u_{S,1}^2 + u_R^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u_{S,2}^2 + u_R^2 & \cdots & u_{S,2}^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & u_{S,2}^2 & \cdots & u_{S,2}^2 + u_R^2 \end{bmatrix}.$$

D.3 Dữ liệu đáp ứng 2

D.3.1 Mô hình đo giống như trong biểu thức (D.1) ngoại trừ thay vì ảnh hưởng hệ thống E là tuyệt đối, D là ảnh hưởng hệ thống tương đối:

$$Y = Y_0(1 + D).$$

D.3.2 Xử lý tương tự như ở D.2 ngoại trừ là lúc này, sử dụng u_D để ký hiệu cho độ không đảm bảo chuẩn tương đối gắn với ước lượng của Y_0,

$$u^2(y_i) = y_i^2 u_D^2 + u_R^2$$

$$\text{cov}(y_i, y_j) = y_i y_j u_D^2.$$

D.3.3 Ma trận hiệp phương sai trong trường hợp này là

$$U_y = \begin{bmatrix} y_1^2 u_D^2 + u_R^2 & y_1 y_2 u_D^2 & \cdots & y_1 y_m u_D^2 \\ y_2 y_1 u_D^2 & y_2^2 u_D^2 + u_R^2 & \cdots & y_2 y_m u_D^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_m y_1 u_D^2 & y_m y_2 u_D^2 & \cdots & y_m^2 u_D^2 + u_R^2 \end{bmatrix}.$$

D.4 Dữ liệu kích thích 1

D.4.1 Dữ liệu sử dụng trong ví dụ ở Điều 10 được rút ra từ mô hình đo dưới đây, thúc đẩy bởi thực tiễn trong đo lường khối lượng trong đó số các khối lượng được sử dụng để tạo ra nhiều giá trị hiệu chuẩn x_i. Dữ liệu kích thích x_i là thể hiện của các biến ngẫu nhiên X_i, $i = 1,\dots,7$, được xác định theo các biến ngẫu nhiên Z_k, $k = 1,2,3$ và D_i, $i = 1,\dots,7$:

$$\begin{aligned} X_1 &= Z_1 + D_1, \\ X_2 &= Z_2 + D_2, \\ X_3 &= Z_1 + Z_2 + D_3, \\ X_4 &= Z_3 + D_4, \\ X_5 &= Z_1 + Z_3 + D_5, \\ X_6 &= Z_2 + Z_3 + D_6, \\ X_7 &= Z_1 + Z_2 + Z_3 + D_7. \end{aligned} \tag{D.2}$$

Các biến ngẫu nhiên Z_k, $k = 1,2,3$, có các kỳ vọng z_k và phương sai $u^2(z_k)$, trong khi D_i có kỳ vọng bằng 0 và phương sai $u_{D,i}^2$. (Trong hiệu chuẩn khối lượng, giá trị z_k là giá trị đã hiệu chuẩn đối với các khối lượng và $u(z_k)$ là độ không đảm bảo kèm theo.)

D.4.2 Độ không đảm bảo $u(z_k)$ và $u(d_i)$ được lan truyền thông qua mô hình đo trong D.4.1 sang những độ không đảm bảo gắn với các ước lượng x_i của X_i bằng cách sử dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008). Sự phụ thuộc chung của X_i vào Z_k có nghĩa là một số hiệp phương sai khác không. Sự lan truyền được mô tả dễ nhất theo thuật ngữ ma trận. Lấy

$$C = [C_D \quad C_Z]$$

là ma trận độ nhạy kích thước 7 x 10, trong đó $C_D = I$ là ma trận đơn vị kích thước 7 x 7 và

$$C_Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

D.4.3 Lấy S_D là ma trận đường chéo kích thước 7 x 7 với thành phần đường chéo $S_D(i,i) = u_{D,i}$, i = 1,...,7, và S_Z là ma trận đường chéo kích thước 3 x 3 với thành phần đường chéo $S_Z(k,k) = u(z_k)$, k = 1,2,3. Đặt

$$B_x = [C_D \quad C_Z]\begin{bmatrix} S_D & 0 \\ 0 & S_Z \end{bmatrix} = [S_D \quad C_Z S_Z]$$

D.4.4 Khi đó, ước lượng tốt nhất của X được cho bằng x = C_Zz kích thước 7 x 1 và ma trận hiệp phương sai kèm theo kích thước 7 x 7 được cho bởi

$$U_x = B_x B_x^{\ T} = S_D^2 + CS_Z^2 S_Z^T.$$

Số hạng S_D^2 là phương sai đóng góp phát sinh từ D_i trong khi số hạng thứ hai là đóng góp từ Z_k.

D.5 Dữ liệu kích thích 2

D.5.1 Dữ liệu sử dụng trong Ví dụ 2 Phụ lục C được rút ra từ mô hình đo dưới đây liên quan đến dữ liệu mô tả trong D.4. Dữ liệu kích thích x_i là thể hiện của các biến ngẫu nhiên X_i, i = 1,...,7, xác định đối với biến ngẫu nhiên Z_k, k = 1, 2, 3:

$$\begin{aligned} X_1 &= Z_1, \\ X_2 &= Z_2, \\ X_3 &= Z_1 + Z_2, \\ X_4 &= Z_3, \\ X_5 &= Z_1 + Z_3, \\ X_6 &= Z_2 + Z_3, \\ X_7 &= Z_1 + Z_2 + Z_3. \end{aligned} \tag{D.3}$$

Các biến ngẫu nhiên Z_k, có các kỳ vọng z_k và phương sai $u^2(z_k)$, k = 1, 2, 3.

D.5.2 Độ không đảm bảo $u(z_k)$ được lan truyền thông qua mô hình đo trong D.5.1 sang những độ không đảm bảo gắn với các ước lượng x_i của X_i sử dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong

TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008). Theo sau ký hiệu của D.4, ước lượng tốt nhất gắn với X_i được cho bởi $x = C_Z z$ kích thước 7 x 1 và ma trận hiệp phương sai kèm theo kích thước 7 x 7 được cho bởi

$$U_x = B_x B_x^{\ T} = C_Z S_Z^2 C_Z^T, \qquad B_x = C_Z S_Z.$$

Trong trường hợp này U_x là không nghịch đảo được.

D.6 Dữ liệu kích thích và đáp ứng

D.6.1 Sự tương quan, tức là, hiệp phương sai khác không, gắn với dữ liệu đo x_i và y_i phát sinh thông qua sự có mặt của các ảnh hưởng chung đến cả hai.

D.6.2 Giả định X và Y có thể được biểu thị bằng mô hình đo

$$X = X_0 + T, \quad Y = Y_0 + T, \tag{D.4}$$

trong đó X_0, Y_0 và T là các biến ngẫu nhiên độc lập với kỳ vọng x_0, y_0 và 0, còn phương sai tương ứng là $u^2(x_0)$, $u^2(y_0)$ và $u^2(t)$.

D.6.3 Tiếp sau biểu thức (D.4), bằng cách áp dụng định luật lan truyền độ không đảm bảo trong TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008), độ không đảm bảo chuẩn $u(x_i)$ và $u(y_i)$ gắn với giá trị đo được x_i của X và y_i của Y được cho bởi

$$u^2(x_i) = u^2(x_0) + u^2(t), \quad u^2(y_i) = u^2(y_0) + u^2(t).$$

Ngoài ra, hiệp phương sai gắn với x_i và y_i là

$$\text{cov}(x_i, y_i) = u^2(t).$$

D.6.4 Nếu thay X và Y có thể biểu thị bằng mô hình đo

$$X = X_0 + T, \quad Y = Y_0 - T,$$

hiệp phương sai gắn với x_i và y_i là

$$\text{cov}(x_i, y_i) = -u^2(t).$$

Phụ lục E

(tham khảo)

Độ không đảm bảo đã biết theo hệ số thang đo

E.1 Phụ lục này mô tả phương pháp để đánh giá độ không đảm bảo gắn với dữ liệu đo trong trường hợp độ không đảm bảo chỉ được biết theo hệ số thang đo.

E.2 Tiêu chuẩn này giả định chung rằng độ không đảm bảo gắn với dữ liệu đo được cung cấp. Đây là tình huống khi các đại lượng (các biến) liên quan đã được mô tả đặc trưng theo các nguyên tắc của TCVN 9595-3:2013 (ISO/IEC Guide 98-3:2008) và ISO/IEC Guide 98-3:2008/Suppl. 1:2008 [13] về phân bố xác suất. Giá trị đo được cho bằng kỳ vọng của biến và phương sai gắn với nó được cho bằng phương sai của biến.

CHÚ THÍCH: Đặc biệt, liên quan đến giá trị đo được y như thể hiện của biến đặc trưng bởi phân bố t có tham số tỷ lệ s và bậc tự do ν (ν >2), độ không đảm bảo chuẩn gắn với y được cho bởi $u(y) = [\nu/(\nu - 2)^{1/2} s$, độ lệch chuẩn của phân bố đó.

E.3 Vì hàm hiệu chuẩn thường được sử dụng trong thực tiễn đo nên việc đánh giá độ không đảm bảo gắn với dữ liệu hiệu chuẩn cần hoàn chỉnh và chặt chẽ nhất có thể. Các ước lượng của tham số hàm hiệu chuẩn và độ không đảm bảo kèm theo khi đó có thể được sử dụng tin cậy. Sự xem xét này giảm nhẹ đề cập trong tiêu chuẩn này là trường hợp trong đó độ không đảm bảo được biết theo hằng số nhân. Trường hợp phổ biến nhất [9, trang 30] là trường hợp trong đó tin tưởng rằng giá trị y đo được có độ không đảm bảo về cơ bản giống nhau nhưng độ không đảm bảo chuẩn chung σ của chúng là chưa biết. (Đây là ví dụ về trường hợp tổng quát hơn trong đó ma trận hiệp phương sai $U = \sigma^2 U_0$, trong đó U_0 đã cho, nhưng σ chưa biết.) Nếu $m > 2$ thì có thể cung cấp ước lượng $\hat{\sigma}$ của σ trên cơ sở sự phân tán của các điểm dữ liệu quanh đường thẳng khớp. Ước lượng này được biết là ước lượng hậu nghiệm của σ, khái niệm "hậu nghiệm" đề cập đến thực tế là chỉ có thể xác định sau khi đã thu được đường thẳng khớp nhất cho dữ liệu.

E.4 Ước lượng hậu nghiệm được xác định bằng cách sử dụng cùng các khái niệm như đã sử dụng trong việc xác nhận giá trị sử dụng của mô hình. Bằng cách đặt thêm giả định rằng dữ liệu đầu vào là thể hiện của biến phân bố chuẩn nhiều chiều, ước lượng hậu nghiệm $\hat{\sigma}$ được chọn sao cho χ^2_{obs} bằng với $m - 2$, kỳ vọng của phân bố Khi-bình phương với $m - 2$ bậc tự do. Trong trường hợp này không thể tiến hành việc xác nhận giá trị sử dụng của mô hình và dữ liệu vì ước lượng hậu nghiệm đã được chọn sao cho chuẩn mực hiệu lực được tự động đáp ứng.

E.5 Do đó, phương pháp này chỉ nên được sử dụng với chú ý đặc biệt. Ví dụ, nếu đồ thị dữ liệu chỉ ra rằng hàm hiệu chuẩn đường thẳng không thích hợp thì không nên sử dụng phương pháp này.

E.6 Các ước lượng tham số a và b không phụ thuộc vào hệ số thang đo σ. Ước lượng của σ chỉ yêu cầu để đánh giá độ không đảm bảo chuẩn $u(a)$ và $u(b)$ và hiệp phương sai cov(a,b) gắn với các ước lượng này. Đối với trường hợp U đã biết hoàn toàn thì có thể đánh giá $u(a)$, $u(b)$ và $\mathrm{cov}(a,b)$ từ dữ liệu và U riêng; không cần có giả định về phân bố gắn với dữ liệu. Với giả định về tính chuẩn, các ước lượng tham số có thể được coi là thể hiện của các biến đặc trưng bởi phân bố hai chiều nhất định, như dưới đây.

E.7 Trong trường hợp dữ liệu có thể được coi là thể hiện của phân bố chuẩn nhiều chiều với ma trận hiệp phương sai U đã biết, phân bố hai chiều trong E.6 là phân bố chuẩn với ma trận hiệp phương sai Ua có các thành phần $u^2(a)$, $u^2(b)$ và hiệp phương sai $\mathrm{cov}(a,b)$ như trong biểu thức (1).

E.8 Đối với trường hợp trong E.4 trong đó phân bố chuẩn nhiều chiều có ma trận hiệp phương sai $U = \sigma^2 U_0$, trong đó U_0 đã biết và σ chưa biết, thì U_0 được sử dụng thay cho U trong tính toán. Ma trận hiệp phương sai

$$U_{a,0} = \begin{bmatrix} u_0^2(a) & \mathrm{cov}_0(a,b) \\ \mathrm{cov}_0(b,a) & u_0^2(b) \end{bmatrix}$$

gắn với các ước lượng của tham số hiệu chuẩn đường thẳng có thể được tính. Nếu $m > 2$ thì có thể sử dụng giá trị Khi-bình phương quan trắc được (xem 6.3) để cung cấp ước lượng hậu nghiệm của hệ số thang đo gắn với độ không đảm bảo đầu vào. Lấy χ^2_{obs} được tính như trong bước 8 của 6.3, và đặt

$$\hat{\sigma}^2 = \chi^2_{obs}/(m-2).$$

E.9 Ma trận hiệp phương sai điều chỉnh tỷ lệ

$$\hat{U}_a = \begin{bmatrix} \hat{u}^2(a) & \widehat{\mathrm{cov}}(a,b) \\ \widehat{\mathrm{cov}}(b,a) & \hat{u}^2(b) \end{bmatrix}$$

khi đó được cho bởi

$$\hat{U}_a = \hat{\sigma} U_{a,0},$$

tức là, độ không đảm bảo chuẩn điều chỉnh tỷ lệ $\hat{u}(a)$, $\hat{u}(b)$ và hiệp phương sai $\widehat{\mathrm{cov}}(a,b)$ gắn với tham số khớp được cho bởi

$$\hat{u}^2(a) = \hat{\sigma}^2 u_0^2(a)\,,\ \hat{u}^2(b) = \hat{\sigma}^2 u_0^2(b)\,,\ \widehat{\mathrm{cov}}(a,b) = \hat{\sigma}^2 \mathrm{cov}_0(a,b). \qquad \text{(E.1)}$$

E.10 Các ước lượng (E.1) được dựa trên việc khớp với một số lượng hữu hạn m điểm dữ liệu và đối với m nhỏ sẽ ước lượng thấp phương sai của phân bố đối với tham số khớp. Với m > 4, ước lượng tốt hơn được xác định [19, chương 8] bằng cách sử dụng

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{m-2}{m-4}\frac{\chi^2_{obs}}{m-2} = \frac{\chi^2_{obs}}{m-4}.$$

CHÚ THÍCH: Với giả định về tính chuẩn, các ước lượng tham số khi đó được gắn với phân bố t hai chiều với ma trận tỷ lệ $\hat{U}_a$ và $m - 2$ bậc tự do. Với $m > 4$, ma trận hiệp phương sai của phân bố đó được cho bởi

$$\tilde{U}_a = \begin{bmatrix} \tilde{u}^2(a) & \widetilde{\mathrm{cov}}(a,b) \\ \widetilde{\mathrm{cov}}(b,a) & \tilde{u}^2(b) \end{bmatrix} = \frac{m-2}{m-4}\hat{U}_a = \tilde{\sigma}^2 U_{a,0}. \qquad \text{(E.2)}$$

trong đó hệ số tăng (m – 2)/(m – 4) tính đến thực tế là σ được ước lượng chứ không phải được biết trước.

VÍ DỤ: (CHƯA BIẾT TRỌNG SỐ) Trong ví dụ này, x_i được lấy là chính xác và y_i có độ không đảm bảo chuẩn bằng nhau nhưng chưa biết, còn ước lượng hậu nghiệm của độ không đảm bảo gắn với tham số khớp được đánh giá từ các phần dư của việc khớp. Việc khớp được xác định bằng cách lấy trọng số bằng 1 (nghĩa là độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ trên danh nghĩa cũng bằng 1). Dữ liệu được cho trong Bảng E.1.

Bảng E.1 – Dữ liệu đại diện cho 6 điểm đo, với trọng số đặt bằng 1

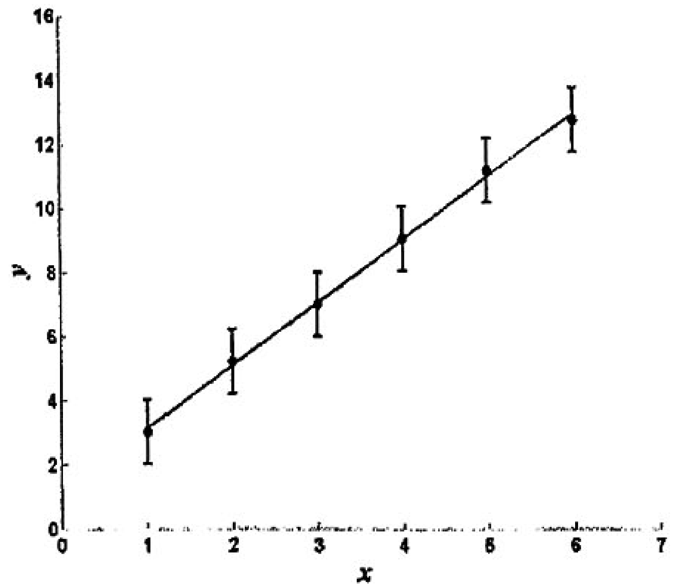
x_i	y_i	$u(y_i)$
1,000	3,014	1
2,000	5,225	1
3,000	7,004	1
4,000	9,061	1
5,000	11,201	1
6,000	12,762	1

Tham số đường thẳng khớp nhất được tính như trong Bảng E.2. Từ bảng này, g_0 = 21,000/6,000 = 3,500, h_0 = 48,267/6,000 = 8,044, b = 34,363/17,500 = 1,964 và a = 8,044 – (1,964)(3,500) = 1,172.

Bảng E.2 – Bảng tính toán đi kèm với dữ liệu trong Bảng E.1

w_i	w_i^2	$w_i^2x_i$	$w_i^2y_i$	g_i	h_i	g_i^2	g_ih_i	r_i	r_i^2
				3,500	8.044			$a = 1.172$	
1.000	1,000	1.000	3.014	−2,500	−5,031	6.250	12,576	−0.122	0.015
1.000	1,000	2,000	5.225	−1,500	−2.819	2,250	4,229	0.126	0.016
1,000	1,000	3,000	7.004	−0,500	−1.040	0.250	0.520	−0.059	0.003
1.000	1,000	4,000	9.061	0,500	1.017	0,250	0.508	0.035	0.001
1.000	1.000	5.000	11.201	1,500	3,157	2,250	4.735	0.211	0,045
1.000	1,000	6.000	12,762	2,500	4,718	6,250	11.794	−0.191	0,037
	6,000	21,000	48.267			17,500	34,363	$b = 1.964$	0,116

Dữ liệu và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp được vẽ trên Hình E.1. Số dư có trọng số được minh họa trên Hình E.2. Do $u(y_i)$ là tùy ý nên đưa ra giá trị 1, trong trường hợp này các vạch độ không đảm bảo vượt quá nhiều các số dư về độ lớn.



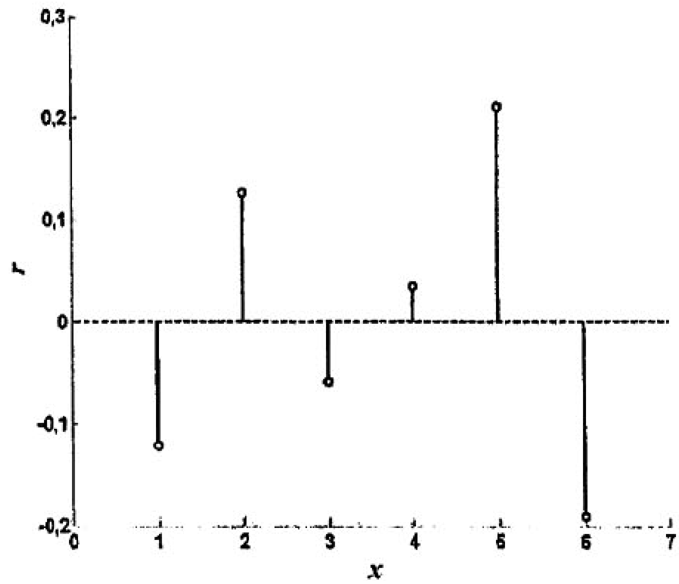
Hình E.1 – Dữ liệu trong Bảng E.1 và hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp thu được trong Bảng E.2

Nếu biết trước là $u(y_i) = 1$, $i = 1,\ldots, m$, thì khi đó độ không đảm bảo gắn với các tham số khớp sẽ được tính toán từ thông tin trong Bảng E.2:

$u^2(a)$ = 1/6,000 + (3,500)²/17,500, như vậy $u(a)$ = 0,931;

$u^2(b)$ = 1/17,500, như vậy $u(b)$ = 0,239;

cov(a,b)= –3,500/17,500 = –0,200.



Hình E.2 – Số dư có trọng số tính bằng cách sử dụng hàm hiệu chuẩn đường thẳng khớp thu được trong Bảng E.2.

Do các tính toán này dựa trên việc ấn định tùy ý $u(y_i) = 1$, nên ước lượng hậu nghiệm $\hat{\sigma}$ của $u(y_i)$ được yêu cầu để đánh giá độ không đảm bảo gắn với các tham số khớp. Từ bảng,

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\chi^2_{obs}}{m-2} = \frac{0,116}{4} = 0,029 \text{, hoặc } \hat{\sigma} = 0,171.$$

Giá trị này của $\hat{\sigma}$ đại diện cho ước lượng của độ không đảm bảo chuẩn $u(y_i)$ gắn với y_i dựa trên giá trị Khi-bình phương quan trắc được. Với ước lượng hậu nghiệm này, các tính toán có thể lặp lại với $u(y_i)$ = 0,171. Các ước lượng cho a và b sẽ không thay đổi nhưng giá trị Khi-bình phương quan trắc và độ không đảm bảo sẽ có tỷ lệ như sau:

$$r_i = \frac{r_i}{\hat{\sigma}},$$

như vậy $\chi^2_{obs}/\hat{\sigma}^2 = m - 2 = 4$, kỳ vọng của phân bố Khi-bình phương với 4 bậc tự do. Sử dụng công thức (E.1),

$$\hat{u}^2(a) = \hat{\sigma}^2 u_0^2(a) = 0,867\hat{\sigma}^2 = 0,025 \text{ như vậy } \hat{u}(a) = 0,931\hat{\sigma} = 0,159$$

$$\hat{u}^2(b) = \hat{\sigma}^2 u_0^2(b) = 0,057\hat{\sigma}^2 = 0,002 \text{ như vậy } \hat{u}(b) = 0,239\hat{\sigma} = 0,041$$

$$\widehat{\text{cov}}(a,b) = \hat{\sigma}^2 \text{cov}_0(a,b) = -0,200\hat{\sigma}^2 = -0,006.$$

Các thành phần của $\hat{U}_a$ là những thành phần sẽ được đánh giá nếu đã biết, theo tiên nghiệm, là $u(y_i) = \hat{\sigma}$. Tuy nhiên, $\hat{\sigma}$ là ước lượng của độ không đảm bảo chuẩn gắn với y_i. Với $m > 4$, tỷ lệ tăng của $(m-2)/(m-4)$ có thể được kết hợp vào ma trận hiệp phương sai để tính đến độ không đảm bảo bổ sung phát sinh từ thực tế $\hat{\sigma}$ là ước lượng rút ra từ m điểm dữ liệu. Sử dụng công thức (E.2),

$$\tilde{U}_a = \frac{m-2}{m-4}\hat{U}_a = 2\begin{bmatrix} 0,025 & -0,006 \\ -0,006 & 0,002 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,050 & -0,012 \\ -0,012 & 0,003 \end{bmatrix},$$

như vậy $\tilde{u}(a) = (0,050)^{1/2} = 0,225$, $\tilde{u}(b) = (0,003)^{1/2} = 0,058$ và $\widetilde{\text{cov}}(a,b) = -0,012$.

Phụ lục F

(tham khảo)

Triển khai phần mềm các thuật toán được mô tả

F.1 Việc triển khai phầm mềm các thuật toán mô tả trong tiêu chuẩn này để xác định và sử dụng hàm hiệu chuẩn đường thẳng đã được Phòng thí nghiệm vật lý quốc gia (NPL – National Physical Laboratory) ở Anh xây dựng. Phầm mềm có sẵn dưới dạng thư mục nén ZIP trên trang tin điện tử của NPL tại địa chỉ www.npl.co.uk/mathematics-scienctific-computing/software-support-for-metrology/software-downloads-(ssfm) và Tổ chức Tiêu chuẩn hóa Quốc tế tại standards.iso.org/iso/ts/28037/.

F.2 Phần mềm, phát triển trong ngôn ngữ lập trình MATLAB [18], được cung cấp dưới dạng tệp M và tệp html xuất bản bằng MATLAB version 7.10.0 (R2010a). Đối với người sử dụng MATLAB, tệp M có thể chạy trực tiếp và cũng có thể sửa đổi để chạy các thuật toán đối với các dữ liệu đo khác nhau. Đối với người sử dụng không tiếp cận được MATLAB, tốt nhất là đọc phần mềm ở dạng tệp html được cung cấp. Có thể sử dụng phần mềm làm cơ sở cho việc chuẩn bị triển khai các thuật toán trong các ngôn ngữ lập trình khác. Trong các tệp, các lệnh được thực hiện cho một số hàm MATLAB cũng bao gồm phần mềm. Ví dụ, hàm algm_gdr1_steps_2_to_5 triển khai các bước 2 đến 5 của quy trình tính toán cho trường hợp 5.3.2 b) (độ không đảm bảo gắn với giá trị đo được x_i và y_i và tất cả các hiệp phương sai gắn với dữ liệu được coi là không đáng kể) quy định trong 7.2.1. Ngoài ra, một số ứng dụng các chức năng tích hợp của MATLAB được đưa ra, ví dụ như để thu được thừa số Cholesky của ma trận. Tập lệnh MATLAB (có đuôi '.m') và tệp html ('.html') được cung cấp như sau:

- TS28037_WLS1 chạy ví dụ số về bình phương tối thiểu có trọng số (WLS) với *trọng số bằng nhau đã biết* mô tả trong Điều 6 và thực hiện dự đoán mô tả trong Ví dụ 1 của 11.1 và đánh giá tiếp mô tả trong 11.2;
- TS28037_WLS2 chạy ví dụ số về bình phương tối thiểu có trọng số (WLS) với *trọng số bằng nhau đã biết* mô tả trong Điều 6 và thực hiện dự đoán mô tả trong Ví dụ 2 của 11.1;
- TS28037_WLS3 chạy ví dụ số về bình phương tối thiểu có trọng số (WLS) với *trọng số không bằng nhau chưa biết* mô tả trong Phụ lục E;
- TS28037_GDR1 chạy ví dụ số về hồi quy khoảng cách tổng quát (GDR) mô tả trong Điều 7;
- TS28037_GDR2 chạy ví dụ số để minh họa thuật toán cho hồi quy khoảng cách tổng quát (GDR) mô tả trong Điều 8;
- TS28037_GMR chạy ví dụ số về hồi quy Gauss-Markov (GMR) mô tả trong Điều 9;
- TS28037_GGMR1 chạy ví dụ số về hồi quy Gauss-Markov tổng quát (GGMR) mô tả trong Điều 10;
- TS28037_GGMR2 chạy ví dụ số về GGMR mô tả trong Điều 10 và Ví dụ 1 của Phụ lục C sử dụng cách tiếp cận thừa số trực giao mô tả trong C.2;

- TS28037_GGMR3 chạy ví dụ số về GGMR mô tả trong Ví dụ 2 của Phụ lục C sử dụng cách tiếp cận thừa số trực giao mô tả trong C.2;

Trong khi dự đoán và đánh giá tiếp chỉ thực hiện trong các tập lệnh giải quyết vấn đề WLS, có thể sao chép và dán mã MATLAB tương ứng với các ứng dụng này của hàm hiệu chuẩn vào bất kỳ tập lệnh nào được cung cấp.

F.3 Phần mềm cần được sử dụng cùng với tiêu chuẩn này. Đặc biệt khuyến nghị người sử dụng nghiên cứu tiêu chuẩn này trước khi chạy phần mềm.

F.4 Phần mềm được cung cấp với thỏa thuận cấp phép phần mềm (REF: MSC/L/10/001) và việc sử dụng phần mềm phải tuân thủ các điều khoản được nêu trong thỏa thuận. Bằng việc chạy mã MATLAB, người sử dụng chấp nhận các điều khoản của thỏa thuận. Các thắc mắc về phần mềm cần được gửi đến NPL tại địa chỉ enquiries@npl.co.uk.

Phụ lục G

(tham khảo)

Từ vựng ký hiệu chính

A	phần chắn của hàm hiệu chuẩn đường thẳng
A^*	giá trị chưa biết của A đối với một hệ thống đo cụ thể
a	ước lượng của A
$\mathbf{a}$	véc tơ $(a, b)^T$ của ước lượng tham số
B	độ dốc của hàm hiệu chuẩn đường thẳng
B^*	giá trị chưa biết của B đối với một hệ thống đo cụ thể
b	ước lượng của B
$\mathrm{cov}(a,b)$	hiệp phương sai gắn với a và b
d_i	$x_i - X_i^*$, thể hiện của biến ngẫu nhiên có kỳ vọng bằng 0 và phương sai $u^2(x_i)$
e_i	$y_i - Y_i^*$, thể hiện của biến ngẫu nhiên có kỳ vọng bằng 0 và phương sai $u^2(y_i)$
L	ma trận tam giác dưới
m	số điểm đo được
r_i	số dư có trọng số hoặc khoảng cách có trọng số đối với điểm dữ liệu thứ i liên quan đến a và b
R_i	số dư có trọng số hoặc khoảng cách có trọng số đối với điểm dữ liệu thứ i biểu thị về đại số liên quan đến A và B
U	ma trận hiệp phương sai kích thước $2m$ x $2m$ gắn với dữ liệu đo (x_i, y_i), $i = 1,\ldots, m$
U_a	ma trận hiệp phương sai kích thước 2 x 2 gắn với $\mathbf{a}$
U_x	ma trận hiệp phương sai kích thước m x m gắn với dữ liệu đo x_i, $i = 1,\ldots, m$
U_y	ma trận hiệp phương sai kích thước m x m gắn với dữ liệu đo y_i, $i = 1,\ldots, m$
u_R	độ lệch chuẩn của biến ngẫu nhiên có phân bố mã hóa kiến thức về ảnh hưởng ngẫu nhiên
u_S	độ lệch chuẩn của biến ngẫu nhiên có phân bố mã hóa kiến thức về ảnh hưởng hệ thống
$u(z)$	độ không đảm bảo chuẩn gắn với z, với z ký hiệu cho a, b, x_i, y_i, ...
v_i	nghịch đảo của $u(x_i)$
w_i	nghịch đảo của $u(y_i)$

X	biến độc lập (kích thích)
X_i	biến độc lập (kích thích) thứ i
X_i^*	giá trị chưa biết của biến độc lập (kích thích) thứ i cung cấp bởi hệ thống đo
x	ước lượng của X (trong trường hợp dự đoán) hoặc giá trị đo được của X (đánh giá tiếp)
x_i	giá trị đo được thứ i của X
x_i^*	ước lượng của biến độc lập (kích thích) thứ i
Y	biến (đáp ứng) phụ thuộc
Y_i	biến (đáp ứng) phụ thuộc thứ i
Y_i^*	giá trị chưa biết của biến (đáp ứng) phụ thuộc thứ i cung cấp bởi hệ đo
y	ước lượng của Y (trong trường hợp dự đoán) hoặc giá trị đo được của Y (đánh giá tiếp)
y_i	giá trị đo được thứ i của Y
y_i^*	ước lượng của biến (đáp ứng) phụ thuộc thứ i
ν	bậc tự do của mô hình, phân bố Khi-bình phương hoặc phân bố t
σ	độ lệch chuẩn của biến ngẫu nhiên đặc trưng bởi phân bố xác suất
$\hat{\sigma}$	ước lượng hậu nghiệm của σ
χ^2_{obs}	giá trị Khi-bình phương quan trắc được
χ^2_{ν}	phân bố Khi-bình phương với ν bậc tự do

Thư mục tài liệu tham khảo

[1] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C. H., Blackford, S., Demmel, J., Dongarra, J. J., Croz, J. D., I. A. Greenbaum, Hammarling, S., McKenney, A., and Sorensen, D. C. LAPACK Users' Guide, 3rd ed., SIAM, Philadelphia, PA, 1999, http://www.netlib.org/lapack/lug/

[2] Bartholomew-Biggs, M., Butler, B. P., and Forbes, A. B. Optimisation algorithms for generalised regression on metrology, In Advanced Mathematical and Computational Tools in Metrology IV (Singapore, 2000), P. Ciarlini, A. B. Forbes, F. Pavese, and D. Richter, Eds., World Scienti c, pp. 21-31 (Các thuật toán tối ưu hóa cho hồi quy tổng quát về đo lường, trong các công cụ toán học và tính toán nâng cao trong đo lường IV)

[3] Boggs, P. T., Byrd, R. H., and Schnabel, R. B. A stable and e cient algorithm for nonlinear orthogonal distance regression, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 8, 6 (1987), 1052-1078 (Thuật toán ổn định và hiệu quả cho hồi quy khoảng cách trực giao phi tuyến)

[4] Butler, B. P., Cox, M. G., Ellison, S. L. R., and Hardcastle, W. A., Eds., Statistics Software Quali cation: Reference Data Sets, Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1996 (Phần mềm thống kê Quali cation)

[5] Carroll, R. J., Ruppert, D., and Stefanski, L. A. Measurement error in nonlinear models, Chapman& Hall/CRC, Boca Raton, 1995 (Lỗi đo lường trong các mô hình phi tuyến tính)

[6] Cox, M. G., Forbes, A. B., Harris, P. M., and Smith, I. M. The classi cation and solution of regression problems for calibration, Tech. Rep. CMSC 24/03, National Physical Laboratory, Teddington, UK, 2003 (Các cation phân loại và giải pháp cho các vấn đề hồi quy đối với hiệu chuẩn)

[7] Draper, N. R., and Smith, H. Applied Regression Analysis, Wiley, New York, 1998, Third edition (Phân tích hồi quy ứng dụng)

[8] Forbes, A. B., Harris, P. M., and Smith, I. M. Generalised Gauss-Markov regression, In Algorithms for Approximation IV (Hudders eld, UK, 2002), J. Levesley, I. Anderson, and J. C. Mason, Eds., University of Hudders eld, pp. 270-277

[9] Fuller, W. A. Measurement Error Models, Wiley, New York, 1987

[10] Golub, G. H., and Van Loan, C. F. Matrix Computations, North Oxford Academic, Oxford, 1983

[11] TCVN 8244-1:2010 (ISO 3534-1:2006), Thống kê học – Từ vựng và ký hiệu – Phần 1: Thuật ngữ chung về thống kê và thuật ngữ dùng trong xác suất

[12] TCVN 8244-2:2010 (ISO 3534-2:2006), Thống kê học – Từ vựng và ký hiệu – Phần 2: Thống kê ứng dụng

[13] ISO/IEC Guide 98-3/Suppl 1, Uncertainty of measurement – Part 3: Guide to the expression of uncertainty in measurement (GUM:1995) – Supplement 1: Propagation of distributions using Monte Carlo method (Độ không đảm bảo đo – Phần 3: Hướng dẫn trình bày độ không đảm bảo đo (GUM:1995) – Phần bổ sung 1: Lan truyền phân bố sử dụng phương pháp Monte Carlo)

[14] TCVN 9598:2013 (ISO 11095:1996), Hiệu chuẩn tuyến tính sử dụng mẫu chuẩn

[15] Kendall, M. G., and Stuart, A. The Advanced Theory of Statistics, Volume 2: Inference and Relationship. Charles Gri n, London, 1961 (Lý thuyết thống kê nâng cao)

[16] Kukush, A., and Van Huffel, S. Consistency of elementwise-weighted total least squares estimator in a multivariate errors-in-variables model AX = B, Metrika 59, 1 (February 2004), 75-97 (Tính nhất quán của ước lượng tổng bình phương nhỏ nhất theo trọng số trong mô hình sai lỗi đa biến)

[17] Mardia, K. V., Kent, J. T., and Bibby, J. M. Multivariate Analysis, Academic Press, London, 1979 (Phân tích đa biến)

[18] MATLAB http://www.mathworks.com/products/matlab/

[19] Migon, H. S. and Gamerman, D. Statistical Inference: An Integrated Approach, Arnold, London, 1999

[20] Paige, C. C. Fast numerically stable computations for generalized least squares problems, SIAM J. Numer. Anal. 16 (1979), 165-171 (Tính toán ổn định số nhanh cho các bài toán bình phương tối thiểu)

[21] Strang, G., and Borre, K. Linear Algebra, Geodesy and GPS, Wiley, Wellesley-Cambridge Press, 1997