

DIN EN ISO 20988

Diese Norm ist Bestandteil des VDI/DIN-Handbuches Reinhaltung der Luft, Band 5
ICS 13.040.01

**Luftbeschaffenheit –
Leitlinien zur Schätzung der Messunsicherheit (ISO 20988:2007);
Deutsche Fassung EN ISO 20988:2007**

Air quality –
Guidelines for estimating measurement uncertainty (ISO 20988:2007);
German version EN ISO 20988:2007

Qualité de l'air –
Lignes directrices pour estimer l'incertitude de mesure (ISO 20988:2007);
Version allemande EN ISO 20988:2007

Gesamtumfang 87 Seiten

Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) im VDI und DIN - Normenausschuss

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (EN ISO 20988:2007) wurde vom Unterkomitee SC 4 „General aspects“ des Technischen Komitees ISO/TC 146 „Air quality“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 264 „Luftbeschaffenheit“ erarbeitet. An der Erstellung dieser Norm waren deutsche Experten des Fachbereiches IV „Umweltmesstechnik“ der Kommission Reinhaltung der Luft (KRdL) im VDI und DIN – Normenausschuss – beteiligt.

Für die in diesem Dokument zitierten internationalen Schriftstücke wird im Folgenden auf die entsprechenden Deutschen Normen und andere deutsche Unterlagen hingewiesen:

ISO 5725-2	siehe DIN ISO 5725-2
ISO 5725-3	siehe DIN ISO 5725-3
ISO 5725-4	siehe DIN ISO 5725-4
ISO 5725-5	siehe DIN ISO 5725-5
ISO 11222	siehe DIN ISO 11222
ISO/IEC Guide 98	siehe DIN V ENV 13005
VIM	siehe Internationales Wörterbuch der Metrologie

Nationaler Anhang NA (informativ)

Literaturhinweise

DIN V ENV 13005, *Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen*

DIN ISO 5725-2, *Genauigkeit (Richtigkeit und Präzision) von Messverfahren und Messergebnissen — Teil 2: Grundlegende Methode für Ermittlung der Wiederhol- und Vergleichpräzision eines vereinheitlichten Messverfahrens*

DIN ISO 5725-3, *Genauigkeit (Richtigkeit und Präzision) von Messverfahren und Messergebnissen — Teil 3: Präzisionsmaße eines vereinheitlichten Messverfahrens unter Zwischenbedingungen*

DIN ISO 5725-4, *Genauigkeit (Richtigkeit und Präzision) von Messverfahren und Messergebnissen — Teil 4: Grundlegende Methoden für die Ermittlung der Richtigkeit eines vereinheitlichten Messverfahrens*

DIN ISO 5725-5, *Genauigkeit (Richtigkeit und Präzision) von Messverfahren und Messergebnissen — Teil 5: Alternative Methoden für die Ermittlung der Präzision eines vereinheitlichten Messverfahrens*

DIN ISO 11222, *Luftbeschaffenheit — Ermittlung der Unsicherheit von zeitlichen Mittelwerten von Luftbeschaffenheitsmessungen*

Internationales Wörterbuch der Metrologie (Deutsche Fassung des „International Vocabulary of Basic and General Terms in Metrology“ — VIM), 2. Auflage, Beuth: Berlin 1994 ¹⁾

1) Zu beziehen durch: Beuth Verlag GmbH, 10772 Berlin (Besucher- und Lieferanschrift: Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin), Tel.: 030 2601-0, Fax: 030 2601-1231

Deutsche Fassung

**Luftbeschaffenheit —
Leitlinien zur Schätzung der Messunsicherheit
(ISO 20988:2007)**

Air quality —
Guidelines for estimating measurement uncertainty
(ISO 20988:2007)

Qualité de l'air —
Lignes directrices pour estimer l'incertitude de mesure
(ISO 20988:2007)

Diese Europäische Norm wurde vom CEN am 9. Juni 2007 angenommen.

Die CEN-Mitglieder sind gehalten, die CEN/CENELEC-Geschäftsordnung zu erfüllen, in der die Bedingungen festgelegt sind, unter denen dieser Europäischen Norm ohne jede Änderung der Status einer nationalen Norm zu geben ist. Auf dem letzten Stand befindliche Listen dieser nationalen Normen mit ihren bibliographischen Angaben sind beim Management-Zentrum des CEN oder bei jedem CEN-Mitglied auf Anfrage erhältlich.

Diese Europäische Norm besteht in drei offiziellen Fassungen (Deutsch, Englisch, Französisch). Eine Fassung in einer anderen Sprache, die von einem CEN-Mitglied in eigener Verantwortung durch Übersetzung in seine Landessprache gemacht und dem Management-Zentrum mitgeteilt worden ist, hat den gleichen Status wie die offiziellen Fassungen.

CEN-Mitglieder sind die nationalen Normungsinstitute von Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, den Niederlanden, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, der Schweiz, der Slowakei, Slowenien, Spanien, der Tschechischen Republik, Ungarn, dem Vereinigten Königreich und Zypern.



EUROPÄISCHES KOMITEE FÜR NORMUNG
EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION
COMITÉ EUROPÉEN DE NORMALISATION

Management-Zentrum: rue de Stassart, 36 B-1050 Brüssel

Inhalt

	Seite
Vorwort	3
Einleitung.....	4
1 Anwendungsbereich	5
2 Normative Verweisungen.....	5
3 Begriffe	5
4 Symbole und Abkürzungen	9
5 Grundlagen.....	11
5.1 Übersicht	11
5.2 Messunsicherheit.....	13
5.3 Korrektur systematischer Einflüsse	14
5.4 Bereitstellung von Eingangsdaten.....	15
6 Problembeschreibung.....	17
6.1 Ziel	17
6.2 Messung	18
6.3 Unsicherheitsparameter.....	19
6.4 Eingangsdaten	19
6.5 Nicht durch Reihen von Beobachtungen beschriebene Einflüsse.....	21
7 Statistische Analyse.....	22
7.1 Ziel.....	22
7.2 Indirekter Ansatz.....	24
7.3 Direkter Ansatz.....	26
7.4 Statistische Gültigkeit	27
8 Schätzung der Varianzen und Kovarianzen.....	28
8.1 Allgemeines.....	28
8.2 Schätzwert für die Varianz vom Typ A	28
8.3 Schätzwerte für die Varianz vom Typ B	28
8.4 Schätzung von Kovarianzen.....	29
9 Ermittlung von Unsicherheitsparametern.....	30
9.1 Ziel.....	30
9.2 Kombinierte Standardunsicherheit.....	30
9.3 Erweiterte Messunsicherheit	31
10 Dokumentation.....	33
Anhang A (informativ) Prüfung einer Überdeckungswahrscheinlichkeit.....	35
Anhang B (informativ) Berechnungsmethoden vom Typ A für Experimente vom Typ A1 bis A8.....	39
Anhang C (informativ) Beispiele	52
Literaturhinweise	85

Vorwort

Dieses Dokument (EN ISO 20988:2007) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 146 „Air quality“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 264 „Luftbeschaffenheit“ erarbeitet, dessen Sekretariat vom DIN gehalten wird.

Diese Europäische Norm muss den Status einer nationalen Norm erhalten, entweder durch Veröffentlichung eines identischen Textes oder durch Anerkennung bis Dezember 2007, und etwaige entgegenstehende nationale Normen müssen bis Dezember 2007 zurückgezogen werden.

Entsprechend der CEN/CENELEC-Geschäftsordnung sind die nationalen Normungsinstitute der folgenden Länder gehalten, diese Europäische Norm zu übernehmen: Belgien, Bulgarien, Dänemark, Deutschland, Estland, Finnland, Frankreich, Griechenland, Irland, Island, Italien, Lettland, Litauen, Luxemburg, Malta, Niederlande, Norwegen, Österreich, Polen, Portugal, Rumänien, Schweden, Schweiz, Slowakei, Slowenien, Spanien, Tschechische Republik, Ungarn, Vereinigtes Königreich und Zypern.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO 20988:2007 wurde vom CEN als EN ISO 20988:2007 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Einleitung

Das allgemeine Konzept der Ermittlung der Messunsicherheit wird im *Leitfaden zur Angabe der Unsicherheit beim Messen* (GUM) beschrieben. Im Vordergrund der praktischen Anleitungen des GUM steht die Auswertung von Reihen unverfälschter Beobachtungen. Messungen der Luftbeschaffenheit können auf Grund von zufälligen Einflüssen, die sich in einer Beobachtungsreihe nicht ändern, nur selten als unverfälscht angesehen werden.

Diese Internationale Norm berücksichtigt bei der Ermittlung der Messunsicherheit zufällige Einflüsse, die zu einer Streuung oder systematischen Abweichung in einer Reihe von Beobachtungen führen. Geeignete Daten können mit geeigneten Experimenten ermittelt werden, die einen Vergleich mit Referenzmaterialien oder mit Referenzmesseinrichtungen oder mit unabhängigen Messungen desselben Typs erlauben. Bei der Bereitstellung von experimentellen Daten zur Unsicherheitsermittlung ist es wichtig, dass die Repräsentativität hinsichtlich der Streuungen und systematischen Abweichungen, die bei der vorgesehenen Anwendung des Messverfahrens auftreten, sichergestellt ist.

Die in dieser Internationalen Norm bereitgestellten allgemeinen Anleitungen und statistischen Verfahren richten sich an Fachleute, die mit Messungen der Luftbeschaffenheit vertraut sind und beispielsweise in der Normung, der Validierung oder der Dokumentation von Verfahren zur Messung der Außenluft, der Innenraumluft, der Emissionen aus stationären Quellen, der Luft am Arbeitsplatz und der Meteorologie tätig sind.

Diese Internationale Norm liefert keine umfassenden Informationen zur Planung und Durchführung von Experimenten, die zum Zwecke der Unsicherheitsermittlung auszuwerten sind.

Unsicherheiten von Messergebnissen, die auf einer unvollständigen zeitlichen Überdeckung der Messdaten beruhen, werden in diesem Dokument nicht behandelt. In diesem Zusammenhang wird auf ISO 11222 [2] verwiesen. Unsicherheiten von Messergebnissen, die durch unvollständige räumliche Überdeckung der Messdaten hervorgerufen werden, werden in diesem Dokument ebenfalls nicht behandelt.

1 Anwendungsbereich

Diese Internationale Norm stellt eine umfassende Anleitung und konkrete statistische Verfahren zur Ermittlung der Unsicherheit von Messungen der Luftbeschaffenheit bereit. Dies schließt Messungen der Außenluft, der Emissionen aus stationären Quellen, der Innenraumlufte, der Luft am Arbeitsplatz und der Meteorologie ein. Diese Internationale Norm wendet die allgemeinen Empfehlungen des *Leitfadens zur Angabe der Unsicherheit beim Messen* (GUM) für die bei Messungen der Luftbeschaffenheit vorliegenden Randbedingungen an. Zu den betrachteten Randbedingungen gehören Messgrößen mit schnellen zeitlichen Änderungen und das Auftreten von systematischen Abweichungen in Beobachtungsreihen, die unter den Bedingungen der vorgesehenen Anwendung des Verfahrens zur Messung der Luftbeschaffenheit gewonnen werden.

Zu den betrachteten Messverfahren zählen

- Verfahren mit einer Korrektur bezüglich systematischer Einflüsse durch mehrmalige Beobachtung von Referenzmaterialien,
- Verfahren mit einer Kalibrierung auf der Basis von Vergleichsmessungen mit einem Referenzverfahren,
- Verfahren ohne Korrektur bezüglich systematischer Abweichungen, da sie auf Grund ihrer Gestaltung keine systematischen Abweichungen aufweisen, und
- Verfahren ohne Korrektur bezüglich systematischer Abweichungen bei der vorgesehenen Anwendung, bei denen die systematischen Abweichungen bewusst zugelassen werden.

Die experimentellen Daten zur Unsicherheitsermittlung können entweder durch ein einzelnes Experiment auf der Basis eines direkten Ansatzes oder durch Kombination verschiedener Experimente auf der Basis eines indirekten Ansatzes geliefert werden.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden zitierten Dokumente sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO/IEC Guide 98:1995, *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM)*

3 Begriffe

3.1

Messunsicherheit

dem Messergebnis zugeordneter Parameter, der die Streuung der Werte kennzeichnet, die vernünftigerweise der Messgröße zugeordnet werden könnte

[ISO/IEC Guide 98:1995, B.2.18; VIM:1993, 3.9]

3.2

Standardunsicherheit

als Standardabweichung ausgedrückte Unsicherheit des Ergebnisses einer Messung

[ISO/IEC Guide 98:1995, 2.3.1]

ANMERKUNG Die Standardunsicherheit eines Messergebnisses ist ein Schätzwert für die Standardabweichung der Verteilung aller möglichen Messergebnisse, die mittels derselben Messmethode für die durch einen eindeutigen Wert gekennzeichnete Messgröße ermittelt werden können.

3.3

kombinierte Standardunsicherheit

Standardunsicherheit eines Messergebnisses, wenn dieses Ergebnis aus den Werten einer Anzahl anderer Größen gewonnen wird, welche gleich der positiven Quadratwurzel einer Summe von Gliedern ist, wobei die Glieder Varianzen oder Kovarianzen dieser anderen Größen sind, gewichtet danach, wie das Messergebnis mit Änderungen dieser Größen variiert

[ISO/IEC Guide 98:1995, 2.3.4]

ANMERKUNG Das Adjektiv „kombiniert“ kann häufig ohne Verlust der Allgemeinheit weggelassen werden.

3.4

erweiterte Messunsicherheit

Kennwert, der einen Bereich $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ um das Messergebnis y kennzeichnet, von dem erwartet werden kann, dass er einen großen Anteil p der Verteilung der Werte umfasst, die der Messgröße vernünftigerweise zugeordnet werden könnten

ANMERKUNG 1 Abgeleitet aus ISO/IEC Guide 98:1995, 2.3.5.

ANMERKUNG 2 Wenn die Unsicherheit hauptsächlich durch Untersuchungen vom Typ A ermittelt wurde, kann das Intervall $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ als Vertrauensbereich des wahren Wertes der Messgröße für ein Vertrauensniveau von p angesehen werden.

ANMERKUNG 3 Das Intervall $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ kennzeichnet den Wertebereich, innerhalb dessen der wahre Wert der Messgröße mit großer Sicherheit liegt (siehe ISO/IEC Guide 98:1995, 2.2.4).

3.5

Erweiterungsfaktor

Zahlenfaktor, mit dem die kombinierte Standardunsicherheit multipliziert wird, um eine erweiterte Messunsicherheit zu erhalten

[ISO/IEC Guide 98:1995, 2.3.6]

3.6

Überdeckungswahrscheinlichkeit

Anteil von Messergebnissen, von dem erwartet wird, dass er von einem festgelegten Intervall überdeckt wird

3.7

Ermittlungsmethode A (der Messunsicherheit)

Methode zur Berechnung der Messunsicherheit durch statistische Analyse von Reihen von Beobachtungen

[ISO/IEC Guide 98:1995, 2.3.2]

3.8

Ermittlungsmethode B (der Messunsicherheit)

Methode zur Berechnung der Messunsicherheit mit anderen Mitteln als der statistischen Analyse von Reihen von Beobachtungen

[ISO/IEC Guide 98:1995, 2.3.3]

3.9

Standardabweichung

positive Quadratwurzel aus der Varianz

[ISO/IEC Guide 98:1995, C.2.12]

ANMERKUNG Im Allgemeinen wird die Standardabweichung der Verteilung einer Zufallsvariablen X durch die positive Quadratwurzel aus einem Schätzwert für die Varianz der Verteilung von X geschätzt.

3.10**empirische Standardabweichung**

für eine Reihe von N Messungen derselben Messgröße die Größe $s(x)$, welche die Streuung der Ergebnisse charakterisiert und durch die Formel

$$s(x) = \sqrt{\sum_{j=1}^N \frac{(x(j) - \bar{x})^2}{N-1}}$$

gegeben ist, wobei $x(j)$ das Ergebnis der j -ten Messung und $\bar{x}$ der arithmetische Mittelwert der N Ergebnisse ist

ANMERKUNG 1 Abgeleitet aus ISO/IEC Guide 98:1995, B.2.17.

ANMERKUNG 2 $s^2(x)$ ist ein unverfälschter Schätzwert für die Varianz $\sigma^2(X)$ der untersuchten Zufallsgröße X , falls die Reihe von Beobachtungen $x(j)$ mit $j = 1$ bis N keinen Bias enthält.

3.11**Varianz**

Erwartungswert des Quadrats der zentrierten Zufallsgröße:

$$\sigma^2(X) = E\{[X - E(X)]^2\}$$

[ISO/IEC Guide 98:1995, C.2.11]

ANMERKUNG Die Varianz $\sigma^2(X)$ der Verteilung einer Zufallsgröße X kann durch das Quadrat der empirischen Standardabweichung $s^2(x)$ einer einfachen Zufallsstichprobe von unbiasierten Beobachtungen $x(j)$ mit $j = 1$ bis N der Zufallsgröße X geschätzt werden. Anderenfalls unterschätzt $s^2(x)$ die Varianz der Verteilung.

3.12**Kovarianz**

Mittelwert des Produkts zweier zentrierter Zufallsgrößen in ihrer gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsverteilung

ANMERKUNG 1 Abgeleitet aus ISO 3534-1:2006, 2.43.

ANMERKUNG 2 Die Kovarianz $\text{cov}(x, y)$ ist eine Kenngröße der Stichprobe, die zur Schätzung der Kovarianz der Grundgesamtheiten von x und y verwendet wird.

3.13**Erwartungswert****Mittelwert**

- 1) Für eine diskrete Zufallsgröße X , die die Werte x_i mit den Wahrscheinlichkeiten p_i annimmt, ist der Erwartungswert durch $E(X) = \sum p_i x_i$ definiert, wobei die Summierung über alle x_i zu erstrecken ist, die von X angenommen werden können.
- 2) Für eine stetige Zufallsgröße X mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x)$ ist der Erwartungswert durch $E(X) = \int x \cdot f(x) \cdot dx$ definiert, wobei die Integration über den Gesamtbereich der Werte von X zu erstrecken ist.

[ISO/IEC Guide 98:1995, C.2.9]

3.14**Freiheitsgrade**

ganz allgemein die Anzahl der Glieder einer Summe abzüglich der Anzahl der Nebenbedingungen, die für die Glieder dieser Summe gelten

[ISO/IEC Guide 98:1995, C.2.31]

ANMERKUNG Für den Schätzwert einer Varianz kann die (effektive) Anzahl der Freiheitsgrade als die Anzahl unabhängiger Informationen angesehen werden, die zur Ermittlung dieses Schätzwertes der Varianz verwendet wurden.

3.15

Messung

Gesamtheit der Tätigkeiten zur Ermittlung eines Größenwertes

[VIM:1993, 2.1]

3.16

Messergebnis

einer Messgröße zugeordneter, durch Messung gewonnener Wert

[VIM:1993, 3.1]

3.17

Empfindlichkeitskoeffizient

Abweichung des Messergebnisses geteilt durch die Abweichung der Einflussgröße, die die Änderung verursacht, wobei alle anderen Einflussgrößen konstant gehalten werden

3.18

Messgröße

spezielle Größe, die Gegenstand einer Messung ist

[VIM:1993, 2.6]

ANMERKUNG Es wird angenommen, dass die Messgröße zumindest für die Zeitdauer einer einzelnen Messung einen bestimmten Wert aufweist.

3.19

Messeinrichtung

Gesamtheit von Geräten und anderen Einrichtungen einschließlich der Bedienungsanweisungen zur Durchführung von festgelegten Luftbeschaffenheitsmessungen

[ISO 11222:2002, 3.9]

ANMERKUNG Eine Messeinrichtung ist eine technische Realisierung eines Messverfahrens. Die Dokumentation des Messverfahrens wird als Bestandteil der Messeinrichtung angesehen.

3.20

Referenzmaterial

RM

Material oder Substanz von ausreichender Homogenität, von dem bzw. der ein oder mehrere Merkmale so genau festgelegt sind, dass sie zur Kalibrierung und/oder Validierung einer Messeinrichtung verwendet werden können

ANMERKUNG 1 Abgeleitet aus VIM:1993, 6.13.

ANMERKUNG 2 Ein Referenzmaterial kann in reiner oder gemischter Form als Gas, Flüssigkeit oder Feststoff vorliegen.

3.21

systematischer Einfluss

Einfluss, der eine systematische Messabweichung verursacht, die gleich bleibend in jeder Reihe von Beobachtungen auftritt, die bei mehrmaliger oder gleichzeitiger Durchführung der Messung ermittelt werden

3.22**zufälliger Einfluss**

Einfluss, der eine zufällige Streuung oder eine systematische Messabweichung mit einem zufälligen Wert (inkonsistente systematische Messabweichung) in einer Reihe von Beobachtungen verursacht, die bei mehrmaliger Durchführung der Messung ermittelt werden

ANMERKUNG Ein Einfluss, der bei mehrmaliger Durchführung der Messung einen festen, aber zufälligen Wert aufweist, verursacht eine systematische Messabweichung, deren Wert zufällig ist.

3.23**systematische Messabweichung****Bias**

systematischer Anteil der Messabweichung eines Messgerätes

[VIM:1993, 5.25]

ANMERKUNG Eine systematische Messabweichung einer Reihe von Beobachtungen vom anerkannten Referenzwert kann entweder durch systematische Einflüsse oder durch zufällige Einflüsse, die einen (unbekannten) festen Beitrag zu den Werten einer Reihe von Beobachtungen liefern, verursacht werden.

3.24**Repräsentativität**

Vermögen einer Reihe von Beobachtungen zur Bereitstellung eines unverfälschten Schätzwertes einer Kenngröße einer festgelegten statistischen Grundgesamtheit

3.25**Grundgesamtheit**

Menge der betrachteten Elemente

[ISO 3534-1:2006, 1.1]

ANMERKUNG Die Grundgesamtheit ist die Menge aller möglichen Messergebnisse, die für eine bestimmte Messgröße mit allen möglichen Realisierungen des festgelegten Messverfahrens ermittelt werden können.

4 Symbole und Abkürzungen

a	Parameter (konstant)
b	Parameter (konstant)
c	Parameter (konstant)
c_i	Empfindlichkeitskoeffizient
$\text{cov}(x_i, x_k)$	Schätzwert für die Kovarianz zwischen Eingangsgrößen x_i und x_k
$E(X)$	Erwartungswert der Zufallsgröße X
i	Index
j	Index
k	Index
k_p	Erweiterungsfaktor
K	Anzahl

L	Anzahl der Laboratorien
M	Anzahl
N	Anzahl
p	Überdeckungswahrscheinlichkeit; Vertrauensniveau
$\sigma(x)$	Standardabweichung der Verteilung einer Zufallsgröße X
$s(x)$	empirische Standardabweichung des Datensatzes $x(j)$ mit $j = 1$ bis N
$t(p, \nu)$	$(1-p)$ -Quantil der Studentschen t -Verteilung mit ν Freiheitsgraden
u_B	durch eine systematische Messabweichung verursachte Messunsicherheit
$u(x_i)$	Standardunsicherheit des Eingangswertes x_i
$u(x_R)$	(kombinierte) Standardunsicherheit des Referenzwertes x_R
$u(y_R)$	(kombinierte) Standardunsicherheit des Referenzwertes y_R
$u(y_R(j))$	(kombinierte) Standardunsicherheit des Referenzwertes $y_R(j)$
$U_p(y)$	erweiterte Messunsicherheit eines Messergebnisses y für einen Überdeckungsgrad p
$\text{var}(x_i)$	Schätzwert der Varianz der Eingangsgröße x_i
$\text{var}(Y)$	Schätzwert der Varianz möglicher Messergebnisse Y
$\text{var}(y)$	Schätzwert der Varianz der Messergebnisse $y(j)$ mit $j = 1$ bis N , die in einem direkten Ansatz beobachtet wurden
$w(y)$	relative Standardunsicherheit eines Messergebnisses y
$W_p(y)$	relative erweiterte Messunsicherheit eines Messergebnisses y für einen Überdeckungsgrad p
x_i	Eingangsgröße der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$
x_R	Referenzwert für die Eingangsgröße x
δX	mögliche Abweichung der Einflussgröße x
Y	mögliches Messergebnis, das bei unabhängiger Wiederholung der Messung, welche zur Erzielung des Messergebnisses y durchgeführt wurde, vernünftigerweise derselben Messgröße zugeordnet werden könnte
y	Messergebnis
y_R	anerkannter Wert des Referenzmaterials der Messgröße
$y_R(i)$	Messergebnis, das mit einem Referenzmessverfahren erzielt wird
δY	mögliche Abweichung eines Messergebnisses y vom (unbekannten) wahren Wert der Messgröße, welche in den auszuwertenden Messdaten nicht implizit enthalten ist
γ	Vertrauensniveau

μ	(unbekannter) wahrer Wert der Messgröße
ν	Anzahl der Freiheitsgrade
ν_{eff}	effektive Anzahl der Freiheitsgrade
$\chi^2(\gamma, \nu)$	γ -Perzentil der Chi-Quadrat-Verteilung mit ν Freiheitsgraden

5 Grundlagen

5.1 Übersicht

Das grundlegende Ziel dieser Internationalen Norm besteht darin, die Anwendung des *Leitfadens zur Angabe der Unsicherheit beim Messen* (GUM) in den verschiedenen Bereichen der Messung der Luftbeschaffenheit zu unterstützen. Dazu zählen Messungen der Außenluft, der Innenraumlufte, der Meteorologie, der Emissionen aus stationären Quellen und der Luft am Arbeitsplatz. Es wird vorausgesetzt, dass Standardverfahren zur Messung der Luftbeschaffenheit vollständig dokumentiert sind, beispielsweise in Normen, Standardarbeitsanweisungen, Berichten über die Validierung oder anderen technischen Dokumenten.

Eine Dokumentation eines Messverfahrens sollte folgende Elemente beinhalten:

- Anweisungen zum vorgesehenen Gebrauch (Standardarbeitsanweisung),
- Anweisungen zur Korrektur systematischer Einflüsse, falls dies angebracht ist,
- Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$, falls das Messergebnis y mit Hilfe beobachteter oder anderweitig bekannter Eingangsgrößen x_i berechnet wird,
- Ergebnisse der Validierung des Messverfahrens, falls dies angebracht ist, und
- Anweisungen, wie Unsicherheitsparameter den Messergebnissen y zuzuordnen sind.

Der Schwerpunkt dieser Internationalen Norm liegt auf der Zuordnung geeigneter Unsicherheitsparameter zu den Messergebnissen, die mit Messmethoden zur Ermittlung der Luftbeschaffenheit erzielt werden. Die Ermittlung der Messunsicherheit erfolgt in fünf Schritten. Dazu gehören

- die Problembeschreibung (siehe Abschnitt 6),
- die statistische Analyse (siehe Abschnitt 7),
- die Schätzung der Varianzen und Kovarianzen (siehe Abschnitt 8),
- die Berechnung der Unsicherheitsparameter (siehe Abschnitt 9) und
- die Dokumentation (siehe Abschnitt 10).

Bild 1 zeigt den Zusammenhang zwischen dem 5-stufigen Verfahren dieser Internationalen Norm und den im GUM empfohlenen acht Stufen.

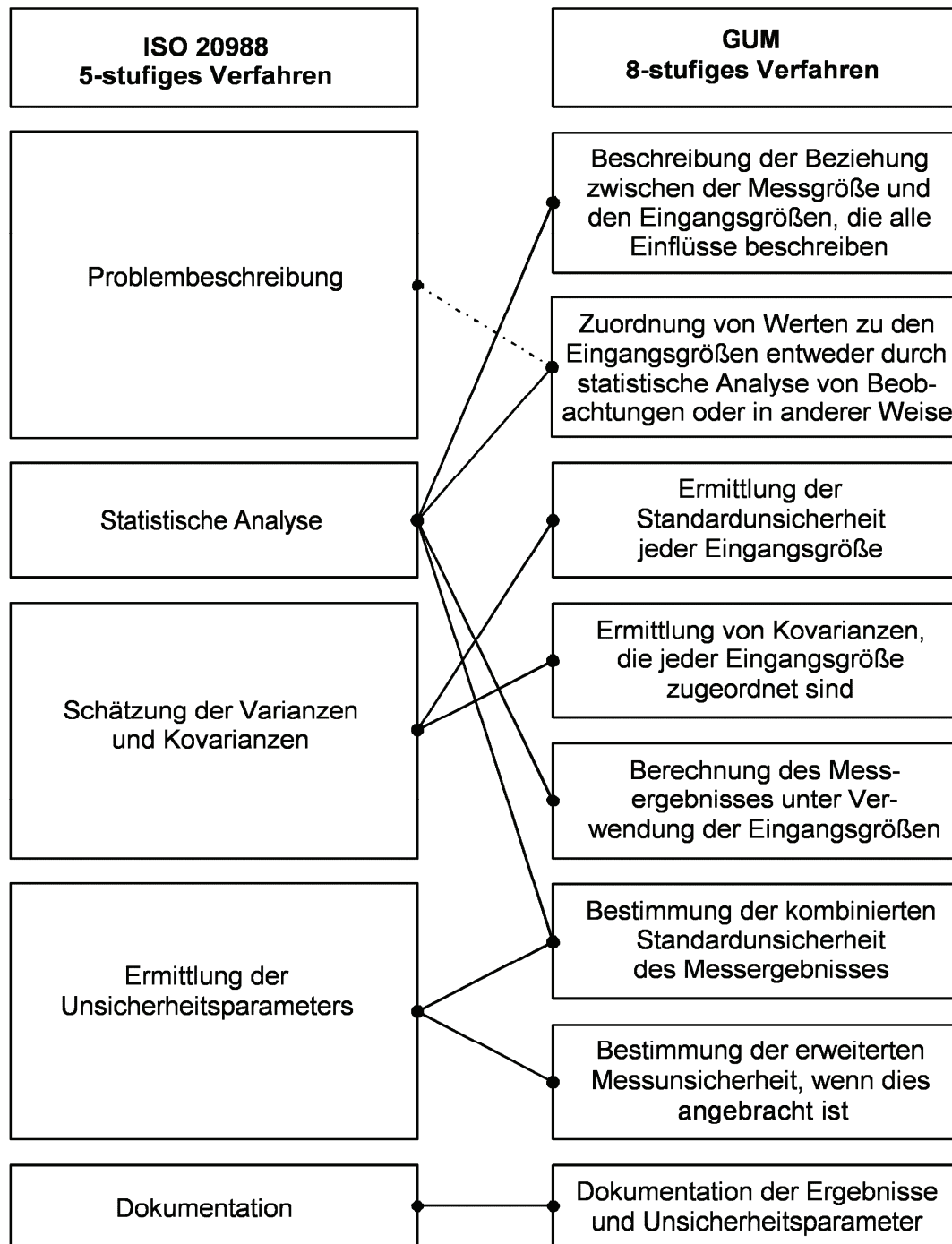


Bild 1 — Vergleich des 5-stufigen Verfahrens nach ISO 20988 (linke Seite) mit dem 8-stufigen Verfahren nach GUM (rechte Seite)

Die Hauptziele der Problembeschreibung als getrennter erster Schritt sind

- die Identifizierung der zu beantwortenden Fragen und
- die Bereitstellung der auszuwertenden Eingangsdaten.

Diese Internationale Norm liefert ausgehend von einer geeigneten Problembeschreibung eine Anleitung zur Anwendung von statistischen Analysen und Berechnungsmethoden, die ohne mathematische Fachkenntnisse anwendbar sind. Die Problembeschreibung erfordert Expertenwissen über die technischen Details der Messung und zumindest Grundkenntnisse des allgemeinen statistischen Konzepts der Unsicherheitsermittlung, wie sie im GUM beschrieben wird. Eine kurze Einführung in die statistischen Details der Unsicherheitsermittlung wird in 5.2, 5.3 und 5.4 gegeben.

5.2 Messunsicherheit

Messunsicherheit ist definiert als „dem Messergebnis zugeordneter Parameter, der die Streuung der Werte kennzeichnet, die vernünftigerweise der Messgröße zugeordnet werden könnte“ (siehe 3.1).

Ein geeigneter Unsicherheitsparameter kann sein:

- die (kombinierte) Standardunsicherheit $u(y)$ eines Messergebnisses y ;
- die erweiterte Messunsicherheit $U_p(y)$ eines Messergebnisses y für einen festgelegten Überdeckungsgrad p .

In Übereinstimmung mit Definition 3.1 ist die (kombinierte) Standardunsicherheit $u(y)$ eines Messergebnisses y die positive Quadratwurzel aus dem Schätzwert $\text{var}(Y)$ der Varianz der Verteilung möglicher Messergebnisse Y , die derselben Messgröße bei unabhängiger Wiederholung der Messung vernünftigerweise zugeordnet werden könnte. Demzufolge besteht die grundlegende Aufgabe der Unsicherheitsermittlung in der Bereitstellung eines Schätzwertes $\text{var}(Y)$ der Varianz der Verteilung möglicher Messergebnisse Y . Eine detaillierte statistische Behandlung dieses Punktes erfolgt in Abschnitt 7.

Nach Definition 3.4 beschreibt die erweiterte Messunsicherheit $U_p(y)$ ein Intervall $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ um ein bestimmtes Messergebnis y , von dem erwartet wird, dass es einen großen Anteil p der möglichen Ergebnisse einschließt, die derselben Messgröße bei unabhängiger Wiederholung der Messung vernünftigerweise zugeordnet werden könnte. Für eine festgelegte Überdeckungswahrscheinlichkeit p kann die entsprechende erweiterte Messunsicherheit $U_p(y)$ häufig als ein Vielfaches der (kombinierten) Standardunsicherheit $u(y)$ bestimmt werden. Dies unterstellt eine Gauß-Verteilung der möglichen Messergebnisse um den eindeutigen aber unbekannten Wert der Messgröße. Details werden in 9.3 beschrieben.

Unter einem Unsicherheitsintervall $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ wird üblicherweise ein Schätzwert verstanden, der den Wertebereich kennzeichnet, innerhalb dessen der wahre Wert der Messgröße liegt (siehe ISO/IEC Guide 98:1995, 2.2.4) bzw. innerhalb dessen der Wert der Messgröße vermutlich liegt [4]. Die Überdeckungswahrscheinlichkeit p beschreibt den Grad der Sicherheit, mit der der wahre Wert der Messgröße in dem Intervall $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ enthalten ist.

Wenn eine festgelegte erweiterte Messunsicherheit $U_p(y)$ und ein geeigneter Satz von Eingangsdaten gegeben sind, kann die Überdeckungswahrscheinlichkeit p des Unsicherheitsintervalls $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ um das beobachtete Messergebnis y in robuster Weise überprüft werden. Diese Methode setzt keine Gauß-Verteilung der möglichen Messergebnisse um den unbekannten Wert der Messgröße voraus. Details werden in Anhang A beschrieben.

Wenn es angebracht ist, kann die kombinierte Standardunsicherheit $u(y)$ als Funktion des Messergebnisses y beschrieben werden, beispielsweise als $w(y) = u(y)/y = \text{konstant}$. Eine derartige Unsicherheitsfunktion kann eng mit der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$ verknüpft sein, die zur Berechnung der Messergebnisse y verwendet wird. Dieses Konzept ist in Bild 2 dargestellt.

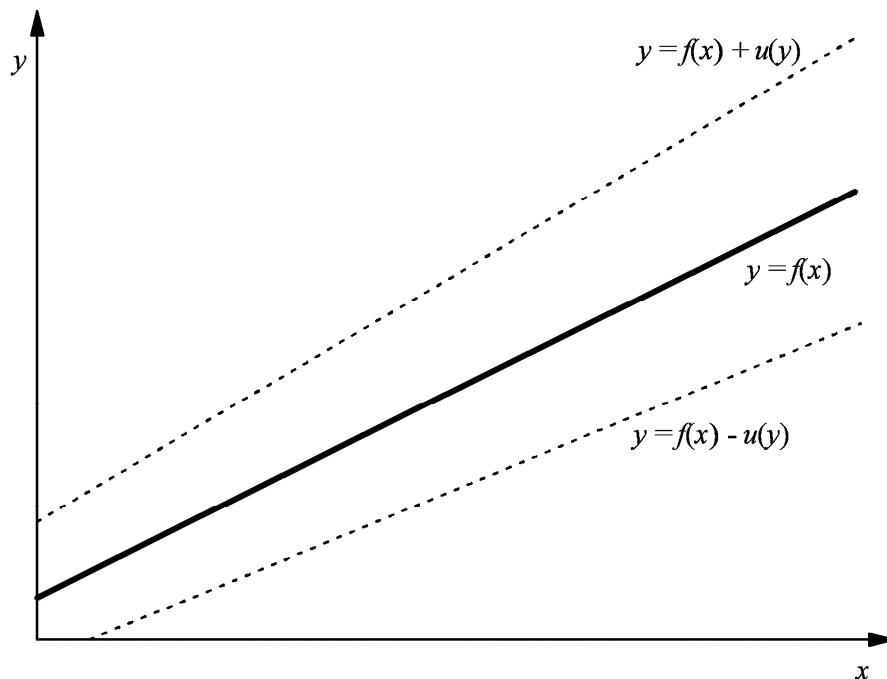


Bild 2 — Methodenmodellgleichung und Unsicherheitsfunktion

In dieser Internationalen Norm wird implizit vorausgesetzt, dass ein Unsicherheitsparameter, der durch die Auswertung eines festgelegten Satzes von Eingangsgrößen ermittelt wird, für die Vorhersage der Unsicherheit zukünftiger Messergebnisse geeignet sein muss, wobei die Messergebnisse mit demselben Messverfahren und unter denselben Bedingungen gewonnen werden, wie die ausgewerteten Eingangsdaten. Um dies sicherzustellen, ist es notwendig, belastbare Beweise bereitzustellen, dass die ausgewerteten Eingangsdaten repräsentativ für die Anwendung des Messverfahrens sind, das die mit einem Unsicherheitsparameter zu qualifizierenden Ergebnisse liefert.

5.3 Korrektur systematischer Einflüsse

Die Korrektur systematischer Einflüsse ist ein integraler Bestandteil einer Messung, wenn dies in der Verfahrensbeschreibung so gefordert wird. Im Allgemeinen geschieht die Korrektur systematischer Einflüsse durch Vergleich mit einem oder mehreren Bezugsnormen, beispielsweise im Rahmen der Kalibrierung oder bei der Driftkontrolle. Geeignete Bezugsnormen können in Form von zertifizierten Referenzmaterialien oder zertifizierten Referenzmessverfahren bereitgestellt werden. Die Rückführbarkeit möglicher Messergebnisse kann durch Vergleich mit Referenzmaterialien, die SI-Einheiten repräsentieren, hergestellt werden. Für Referenzverfahren, die primäre Bezugsnormale darstellen, ist ein Vergleich mit anderen Bezugsnormen zum Zwecke der Korrektur nicht notwendig.

Der GUM empfiehlt grundsätzlich, dass für alle erkannten signifikanten systematischen Einflüsse Korrekturen angebracht werden sollten (siehe ISO/IEC Guide 98:1995, 3.2.4). Im Allgemeinen kann eine in der Verfahrensdokumentation beschriebene Korrektur einen bestimmten Grad von Unvollständigkeit aufweisen, beispielsweise auf Grund ihres statistischen Charakters und auf Grund der endlichen Unsicherheit der zu diesem Zwecke verwendeten Referenzstandards. Als Folge der Unvollständigkeit der Korrektur kann eine Reihe von korrigierten Messwerten, die mit derselben Messeinrichtung gewonnen werden, einen Restbias aufweisen, der als Zufallsgröße mit dem Erwartungswert null angenommen wird.

Falls bei einer Messung eine Korrektur mittels einer zur Berechnung des Messergebnisses verwendeten Methodenmodellgleichung angebracht wird, wird die Unsicherheit der Korrektur richtig berücksichtigt.

Falls ein Bias nicht korrigiert wird, ist er als zusätzliche Unsicherheitsquelle zu berücksichtigen.

Für die Unsicherheitsermittlung ist es daher notwendig, Reihen von Beobachtungen durchzuführen, die dem Anwender eine Ermittlung der Streuungen und der systematischen Messabweichungen, wie sie bei der vorgesehenen Anwendung des Messverfahrens auftreten, erlauben.

ANMERKUNG Die Begriffe „Effekt“, „Einfluss“ und „Unsicherheitsquelle“ werden in dieser Internationalen Norm gleichwertig verwendet.

5.4 Bereitstellung von Eingangsdaten

Eingangsdaten für die Unsicherheitsermittlung müssen repräsentativ sein für alle Einflüsse, die Streuungen oder systematische Abweichungen in den Messergebnissen verursachen. Geeignete Eingangsdaten können als Reihen von Beobachtungen oder durch externe Quellen oder durch fachkundige Beurteilung geliefert werden.

Aus praktischen Gesichtspunkten kann die Unsicherheitsermittlung entweder mit einem indirekten Ansatz oder mit einem direkten Ansatz durchgeführt werden.

Bei einem indirekten Ansatz werden Streuungen und systematische Messabweichungen in einem ersten Schritt getrennt für die Eingangsgrößen x_i der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$, die zur Berechnung eines Messergebnisses y verwendet wird, ermittelt. Zu diesem Zwecke können Schätzwerte der Varianzen und Kovarianzen der Eingangsgrößen x_i durch Auswertung von Reihen von Beobachtungen nach der Ermittlungsmethode A oder durch fachkundige Beurteilung nach der Ermittlungsmethode B bereitgestellt werden. Anschließend liefert eine gewichtete Summe der Varianzen und Kovarianzen den gesuchten Unsicherheitswert.

Bei einem direkten Ansatz wird der Einfluss der dominierenden Einflüsse, die Streuungen und systematische Messabweichungen des Messergebnisses y verursachen, in einer kombinierten Weise durch Vergleich mit einem oder mehreren Referenzwerten der Messgröße untersucht. Einflüsse, die beim direkten Ansatz nicht variiert werden, müssen getrennt berücksichtigt werden, beispielsweise durch fachkundige Beurteilung nach der Ermittlungsmethode B. Bei einem direkten Ansatz kann die Ermittlung der Unsicherheit deutlich einfacher sein als bei einem indirekten Ansatz.

Der Schwerpunkt des GUM liegt auf dem indirekten Ansatz, wobei der direkte Ansatz jedoch nicht ausgeschlossen wird.

Die grundlegende Ermittlungsmethode A, die im GUM beschrieben wird, erfordert eine Reihe von unbasierten Beobachtungen derselben unveränderten Messgröße mit derselben Messeinrichtung. Dieses Experiment liefert eine einfache Zufallsstichprobe. Aus praktischen Gesichtspunkten erfordert eine einfache Zufallsstichprobe eine vollständige Randomisierung aller Einflüsse zwischen mehrmaligen Beobachtungen derselben unveränderten Messgröße. Eine einfache Zufallsstichprobe ist unter den Bedingungen des vorgesehenen Einsatzes von Verfahren zur Messung der Luftbeschaffenheit nur selten realisierbar. Dies liegt hauptsächlich an dem möglichen Auftreten von unkorrigierten systematischen Messabweichungen. Die Ausführungen des GUM im Hinblick auf die Ermittlungsmethode A sind nicht erschöpfend. Es gibt viele Situationen, in denen statistische Methoden angewandt werden können, die von der grundlegenden Ermittlungsmethode A, wie sie im GUM (siehe ISO/IEC Guide 98:1995, 4.2.8) beschrieben wird, abweichen.

Bei Messungen der Luftbeschaffenheit ist es häufig bequemer und kostengünstiger, die Eingangsdaten für die Unsicherheitsermittlung in Experimenten, die sich von einer einfachen Zufallsstichprobe unterscheiden, zu ermitteln. In dieser Internationalen Norm werden die folgenden Experimente behandelt:

- A1: einfache Zufallsstichprobe;
- A2: mehrmalige Beobachtung eines Referenzmaterials mit einer Messeinrichtung;
- A3: Beobachtung verschiedener Referenzmaterialien im Rahmen einer Kalibrierung;
- A4: mehrmalige Beobachtung von verschiedenen Referenzmaterialien mit identischen Messeinrichtungen;
- A5: Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren;

A6: Doppelbestimmungen mit zwei identischen Messeinrichtungen;

A7: Ringversuch mehrerer Laboratorien mit identischen Messeinrichtungen;

A8: Vergleichsmessungen mit identischen Messeinrichtungen.

Die Experimente vom Typ A1 bis A8 sind bei indirekten und direkten Ansätzen zur Ermittlung der Unsicherheit von Verfahren zur Messung der Luftbeschaffenheit anwendbar. Zu diesen Messverfahren zählen:

- Messverfahren mit Korrektur systematischer Einflüsse durch (mehrmalige) Beobachtung von Referenzmaterial;
- Messverfahren, die durch mehrmalige Beobachtung von Referenzmaterialien einer Messgröße vor der Routineanwendung validiert wurden;
- Messverfahren, die in Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren kalibriert wurden;
- Messverfahren, die in Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren überprüft wurden;
- gesetzliche oder vereinbarte Referenzmessverfahren, die in Ringversuchen validiert wurden.

Geeignete Reihen von Beobachtungen können beispielsweise durch Anwendung eines der folgenden Verfahren bereitgestellt werden:

- Verfahren zur Qualitätssicherung und Qualitätskontrolle, die mehrmalig auf die Messeinrichtung angewandt werden;
- Verfahren zur einmaligen Überprüfung der Messeinrichtung;
- Verfahren zur Untersuchung mehrerer Messeinrichtungen desselben Typs;
- Verfahren zur einmaligen Validierung mehrerer Messeinrichtungen desselben Typs;
- eine weitere Eignungsprüfung der Messeinrichtung.

Eingangsdaten für die Unsicherheitsermittlung können auch durch externe Quellen bereitgestellt werden, falls diese Daten durch eine statistische Untersuchung von Reihen von Beobachtungen gewonnen wurden. Dazu zählen anerkannte Werte und Unsicherheiten von Referenzmaterialien, Werte und Unsicherheiten von Gerätekonstanten aus unabhängigen Berichten oder Werte und Unsicherheiten von physikalischen und chemischen Konstanten aus Handbüchern (siehe ISO/IEC Guide 98:1995, 4.1.3).

ANMERKUNG Die Verwendung externer Daten über die Vergleichspräzision und Richtigkeit eines Messverfahrens, die nach ISO 5725-2 [5], ISO 5725-3 [6], ISO 5725-4 [7] und ISO 5725-5 [8] gewonnen wurden, wird in ISO/TS 21748 [9] beschrieben.

Falls Eingangsdaten nicht als Reihen von Beobachtungen oder durch externe Quellen bereitgestellt werden können, können solche Daten durch fachkundige Beurteilung und Auswertung nach Ermittlungsmethode B ermittelt werden.

Die Übertragbarkeit eines Unsicherheitsparameters auf zukünftige Messergebnisse, die mit dem untersuchten Messverfahren ermittelt werden, hängt von der Repräsentativität der Eingangsdaten ab. Der Grad der durch die Eingangsdaten erzielten Repräsentativität hängt von den folgenden Größen ab:

- den durch die Eingangsdaten beschriebenen Einflüssen;
- der Stichprobengröße der ermittelten Reihe von Beobachtungen;
- der Unsicherheit der bei der Untersuchung verwendeten Referenzstandards.

Je besser die Eingangsdaten alle Einflüsse, die die Messung beeinflussen, beschreiben und je geringer die Unsicherheit der Referenzstandards ist, desto besser ist die Vorhersagekraft eines ermittelten Unsicherheitsparameters für zukünftige Messergebnisse.

Natürlich ist es wichtig, die Vorhersagekraft eines Unsicherheitsparameters beispielsweise durch eine andere unabhängige Untersuchung der Messunsicherheit zu prüfen.

Für die Schätzung einer erweiterten Unsicherheit $U_{0,95}(y)$ für ein Vertrauensniveau von 95 % wird empfohlen, dass die Reihe von Beobachtungen mindestens 20 durch Anwendung des festgelegten Messverfahrens ermittelte Ergebnisse enthält. Sonst kann die Anwendbarkeit des ermittelten Unsicherheitsparameters nicht einer aussagekräftigen Prüfung unterzogen werden.

Für die Schätzung einer erweiterten Messunsicherheit $U_{0,66}(y)$ für ein Vertrauensniveau von 66 % wird empfohlen, dass die Reihe von Beobachtungen mindestens sieben durch Anwendung des festgelegten Messverfahrens ermittelte Ergebnisse enthält. Sonst kann die Anwendbarkeit des ermittelten Unsicherheitsparameters nicht einer aussagekräftigen Prüfung unterzogen werden.

Details zur Bereitstellung von Eingangsdaten und zu den anwendbaren mathematischen Berechnungsmethoden werden in 6.4 und 8.2 beschrieben.

6 Problembeschreibung

6.1 Ziel

Das Ziel der Problembeschreibung bei der Unsicherheitsermittlung ist die Identifizierung

- der zu betrachtenden Messung,
- der geforderten Unsicherheitsparameter,
- der auszuwertenden Eingangsdaten und
- der Einflüsse, die nicht durch die Eingangsdaten beschrieben werden.

Bild 3 beschreibt die Beziehungen zwischen den Elementen der Problembeschreibung im Rahmen der Unsicherheitsermittlung. Die Problembeschreibung erfordert Fachkenntnisse hinsichtlich der technischen Details der betrachteten Messung. Die Anleitungen in 6.2 bis 6.4 sind ohne Fachkenntnisse der statistischen Modellierung von Messprozessen anwendbar.

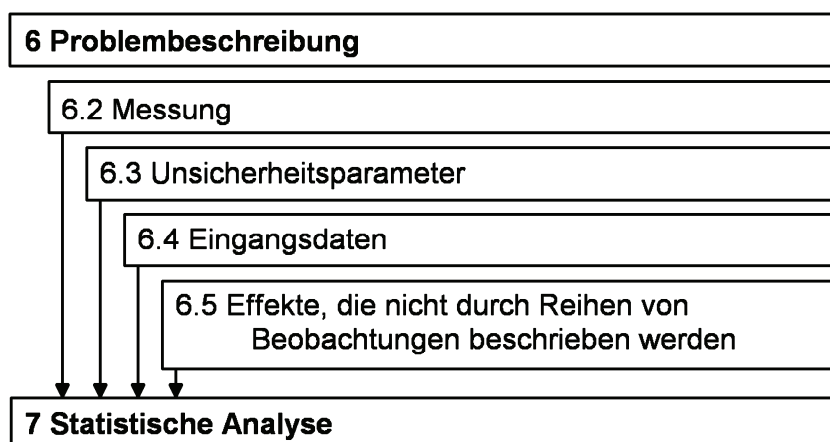


Bild 3 — Elemente der Problembeschreibung im Rahmen der Unsicherheitsermittlung

6.2 Messung

Die Messung ist (mindestens) durch die folgenden Angaben festzulegen:

- die Messgröße,
- das Messverfahren,
- die Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$, wenn Messergebnisse y mit beobachteten oder anderweitig bestimmten Eingangsgrößen x_i berechnet werden, und
- die vorgesehene Anwendung des Messverfahrens.

Die Messgröße ist so festzulegen, dass sie zumindest für die Zeitdauer, die für eine einzelne Messung benötigt wird, einen zwar unbekannten, aber eindeutigen Wert μ aufweist.

Die Messgröße ist die physikalische Größe, der durch die festgelegte Messung ein Zahlenwert und eine Einheit zuzuweisen ist. Weiterhin ist die Messgröße so festzulegen, dass sie zumindest im Prinzip mehreren Messungen unterworfen werden könnte. Dies ist eher wichtig für die Bereitstellung von Eingangsdaten, als für die routinemäßige Durchführung eines betrachteten Messverfahrens. Im Bereich der Luftbeschaffenheit kann die Messgröße ihren Wert in Abhängigkeit von der Zeit und vom Ort ändern.

Das Messverfahren ist vollständig festzulegen, beispielsweise durch

- das anzuwendende Verfahren, z. B. die Standardarbeitsanweisung (SOP),
- die Art der Anwendung (z. B. zur routinemäßigen Überwachung der Emissionen aus stationären Quellen, zur routinemäßigen Überwachung der Luft am Arbeitsplatz, zur routinemäßigen Überwachung der Außenluft oder als Referenzverfahren in einem Labor),
- die Umgebungsbedingungen der jeweiligen Anwendung (z. B. Änderungen der Umgebungsbedingungen) und
- die Kontrollbedingungen (z. B. für die Kalibrierung oder die Driftkontrolle).

Geeignete Beschreibungen sind häufig als Teil der Verfahrensdokumentation verfügbar.

Weitere Informationen über das Messverfahren können bereitgestellt werden, beispielsweise Informationen über Einflüsse, die Streuungen und systematische Messabweichungen bei der betrachteten Anwendung verursachen.

Wenn die Messergebnisse y in der vorgesehenen Anwendung mit einer Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$ unter Verwendung beobachteter oder anderweitig ermittelter Eingangsgrößen x_i berechnet werden, muss die mathematische Struktur der Modellgleichung bei Verwendung eines indirekten Ansatzes bekannt sein. Die Grundlagen des direkten und indirekten Ansatzes werden in 5.4 beschrieben.

ANMERKUNG 1 In dieser Internationalen Norm wird die Messgröße als eine quantifizierbare Eigenschaft eines Messobjektes verstanden. Das Messobjekt kann beispielsweise ein Abgas, das von einem Kamin mit festgelegtem Querschnitt in einem festgelegten Zeitintervall emittiert wird, oder die Umgebungsluft, die an einer festgelegten Probenahmestelle in einem festgelegten Zeitintervall vorliegt, sein. Die entsprechende Messgröße kann beispielsweise die Masse (Massenstrom) von Schwefeldioxid sein, die von dem festgelegten Kamin in dem festgelegten Zeitintervall emittiert wird, oder die Konzentration von Schwefeldioxid in der Umgebungsluft an einem festgelegten Ort in einem festgelegten Zeitintervall.

ANMERKUNG 2 Die Methodenmodellgleichung bei Messungen der Luftbeschaffenheit wird auch „Analysefunktion“ genannt.

Die vorgesehene Anwendung des Messverfahrens ist so festzulegen, dass die Repräsentativität der Eingangsdaten richtig bewertet werden kann. Dadurch wird sichergestellt, dass ein ermittelter Unsicherheitsparameter geeignet ist, die in der vorgesehenen Anwendung des Messverfahrens ermittelten Messergebnisse zu beschreiben. Aus statistischer Sicht beschreibt die Anwendung des Messverfahrens die statistische Grundgesamtheit der möglichen Messergebnisse Y , die in der Unsicherheitsermittlung zu betrachten sind.

Die Anwendung des Messverfahrens kann beispielsweise wie folgt festgelegt werden:

- Anwendung einer einzelnen Messeinrichtung unter gut definierten Laborbedingungen;
- Anwendung verschiedener Messeinrichtungen desselben Typs, die in einem Messnetz vom selben Labor eingesetzt werden;
- Anwendung verschiedener Messeinrichtungen desselben Typs, die in einem weiten Bereich von Feldbedingungen von verschiedenen Laboratorien eingesetzt werden.

6.3 Unsicherheitsparameter

Der geforderte Unsicherheitsparameter ist festzulegen. Der für die festgelegte Grundgesamtheit von Messergebnissen y bereitzustellende Unsicherheitsparameter kann eine der folgenden Größen sein:

- die (kombinierte) Standardunsicherheit $u(y)$ in Einheiten von y ;
- die relative Standardunsicherheit $w(y)$;
- die erweiterte Messunsicherheit $U_p(y)$ für einen festgelegten Überdeckungsgrad p in Einheiten von y ;
- die relative erweiterte Messunsicherheit $W_p(y)$ für einen festgelegten Überdeckungsgrad p .

Die Unsicherheitsermittlung kann erheblich vereinfacht werden, wenn ein einheitlicher Unsicherheitsparameter für einen festgelegten Bereich von Werten y des Messergebnisses gültig ist. Weitere Information über Unsicherheitsparameter werden in Abschnitt 9 gegeben.

6.4 Eingangsdaten

6.4.1 Allgemeines

Es sind mindestens die folgenden Details über die Eingangsdaten für die Unsicherheitsermittlung anzugeben:

- der verwendete Ansatz zur Untersuchung der Streuung und des Bias, wie sie in der vorgesehenen Anwendung des Messverfahrens auftreten;
- das Experiment (die Experimente) zur Erhebung der Reihe von Beobachtungen;
- die auszuwertende Reihe von Beobachtungen;
- die Repräsentativität der als Eingangsdaten bereitgestellten Reihe von Beobachtungen.

Der zur Untersuchung der Streuungen und des Bias verwendete Ansatz kann entweder ein indirekter oder ein direkter Ansatz sein.

Bei einem direkten Ansatz werden die Eingangsdaten in einem einzelnen Experiment ermittelt, das die Abweichungen und den Bias durch Vergleich mit einem oder mehreren Referenzwerten der Messgröße liefert.

Bei einem indirekten Ansatz werden die Eingangsdaten für die verschiedenen Eingangsgrößen x_i der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$, die zur Berechnung des Messergebnisses y verwendet wird, in verschiedenen Experimenten ermittelt.

Tabelle 1 fasst die in dieser Internationalen Norm betrachteten Experimente vom Typ A1 bis A8 zusammen. Die anwendbaren Berechnungsmethoden vom Typ A für diese Experimente werden in Anhang B beschrieben.

Tabelle 1 — Experimente und Eingangsdaten

Typ	Experiment	Typische Anwendung	Eingangsdaten	
			Direkter Ansatz	Indirekter Ansatz
A1	Einfache Zufallsstichprobe	Mehrmalige unbasierte Beobachtung derselben (unbekannten) Messgröße mit derselben Messeinrichtung	$y(j)$ mit $j = 1$ bis N	$x_i(j)$ mit $j = 1$ bis N
A2	Mehrmalige Beobachtung eines Referenzmaterials mit einer Messeinrichtung	Driftkontrolle einer Messeinrichtung	$y(j)$ mit $j = 1$ bis N y_R	$x_i(j)$ mit $j = 1$ bis N $x_{R,i}$
A3	Beobachtung verschiedener Referenzmaterialien im Rahmen einer Kalibrierung	Kalibrierung mit mindestens 3 wiederholten Beobachtungen jedes Referenzmaterials	$x(j)$ mit $j = 1$ bis N $y_R(j)$ mit $j = 1$ bis N	$z(j)$ mit $j = 1$ bis N $x_R(j)$ mit $j = 1$ bis N
A4	Beobachtung verschiedener Referenzmaterialien mit identischen Messeinrichtungen	Verfahrensvalidierung vor der Routineanwendung mit N unabhängigen Beobachtungen von verschiedenen Referenzmaterialien	$x(j)$ mit $j = 1$ bis N $y_R(j)$ mit $j = 1$ bis N	$z(j)$ mit $j = 1$ bis N $x_R(j)$ mit $j = 1$ bis N
A5 Fall 1	Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren	Kalibrierung mit N unkorrigierten Messsignalen aus Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren	$x(j)$ mit $j = 1$ bis N $y_R(j)$ mit $j = 1$ bis N	$z(j)$ mit $j = 1$ bis N $x_R(j)$ mit $j = 1$ bis N
A5 Fall 2	Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren	Überprüfung mit N unkorrigierten Messsignalen aus Vergleichsmessungen mit einem Referenzmessverfahren	$y(j)$ mit $j = 1$ bis N $y_R(j)$ mit $j = 1$ bis N	$x(j)$ mit $j = 1$ bis N $x_R(j)$ mit $j = 1$ bis N
A6	Doppelbestimmungen mit zwei identischen Messeinrichtungen	Validierung eines Referenzmessverfahrens; Validierung eines kalibrierten Messverfahrens.	$\{y(1, j); y(2, j)\}$ mit $j = 1$ bis N	$\{x(1, j); x(2, j)\}$ mit $j = 1$ bis N
A7	Ringversuch mit identischen Messeinrichtungen	Vergleich mit N Beobachtungen derselben Messgröße durch K Laboratorien mit demselben Messverfahren	$y(k, j)$ mit $j = 1$ bis N und $k = 1$ bis K	$x(k, j)$ mit $j = 1$ bis N und $k = 1$ bis K
A8	Vergleichsmessungen mit identischen Messeinrichtungen	N Vergleichsmessungen mit K identischen Messeinrichtungen	$y(k, j)$ mit $j = 1$ bis N und $k = 1$ bis K	$x(k, j)$ mit $j = 1$ bis N und $k = 1$ bis K

Experimente, die in Tabelle 1 nicht aufgeführt sind, dürfen für die Unsicherheitsermittlung ebenfalls ausgewertet werden, wenn ihre Durchführung und statistische Auswertung in ausreichender Weise dokumentiert werden.

Zur Beurteilung der Repräsentativität der Eingangsdaten hinsichtlich der möglichen Messergebnisse, die durch den festgelegten Unsicherheitsparameter zu beschreiben sind, müssen die Experimente zur Erhebung der Eingangsdaten in ausreichender Weise dokumentiert werden. Die Ergebnisse der Beurteilung der Repräsentativität der Eingangsdaten sind zu dokumentieren.

6.4.2 Beurteilung der Repräsentativität

Für die als Eingangsdaten bereitgestellte Reihe von Beobachtungen ist eine Beurteilung vorzunehmen, ob in der verwendeten Datenerhebung

- a) das Messverfahren in Übereinstimmung mit denselben Standardarbeitsanweisungen bedient wurde, wie in der vorgesehenen Anwendung,
- b) die Umgebungsbedingungen zumindest den Streubereich überdeckten, der bei der vorgesehenen Anwendung des Messverfahrens zu erwarten ist,
- c) die Kontrollbedingungen des Messverfahrens dieselben waren, wie bei der vorgesehenen Anwendung,
- d) die zur Korrektur des Messverfahrens verwendeten Bezugsnormale von derselben Qualität waren, wie die bei der vorgesehenen Anwendung verwendeten, falls dies angebracht ist,
- e) alle Teile des Messverfahrens einer entweder getrennten oder kombinierten experimentellen Untersuchung, die die betrachtete Reihe von Beobachtungen liefert, unterworfen waren und
- f) der Einfluss der Bedienung des Messverfahrens durch verschiedene Laboratorien in einem Experiment ermittelt wurde, falls dies angebracht ist.

Falls die Aufzählungen a) bis f) in ausreichender Weise erfüllt sind, kann die bereitgestellte Reihe von Beobachtungen als repräsentativ für die festgelegte Unsicherheitsermittlung angesehen werden. Aufzählung d) gilt für Messverfahren, die eine Korrektur systematischer Einflüsse benötigen. Aufzählung f) gilt, wenn der Unsicherheitsparameter Messergebnisse beschreiben muss, die durch verschiedene Laboratorien unter Verwendung des festgelegten Messverfahrens ermittelt werden bzw. zu ermitteln sind.

Wenn einer oder mehrere der Aufzählungen a) bis f) nicht in geeigneter Weise erfüllt sind, werden zusätzliche Informationen zur Bereitstellung von repräsentativen Eingangsdaten benötigt. Zusätzliche Eingangsdaten können entweder durch besser geeignete Reihen von Beobachtungen oder durch fachkundige Beurteilung entsprechend der Beschreibung in 6.5 bereitgestellt werden.

6.5 Nicht durch Reihen von Beobachtungen beschriebene Einflüsse

Wenn ein Einfluss, der durch Streuungen oder systematische Messabweichungen verursacht wird, durch eine Reihe von Beobachtungen nicht in einer repräsentativen Weise beschrieben wird, obwohl eine Beeinflussung möglicher Messergebnisse erwartet wird, muss dieser Einfluss separat beschrieben werden, beispielsweise durch eine zusätzliche Abweichung δY_j des Messergebnisses. Der Zahlenwert einer solchen zusätzlichen Abweichung muss im Rahmen einer fachkundigen Beurteilung festgestellt werden. Die grundlegende Aufgabe der fachkundigen Beurteilung besteht in der Bereitstellung eines Schätzwertes für den größten Bereich der Streuung $[\min(\delta Y_j) \leq \delta Y_j \leq \max(\delta Y_j)]$ der Abweichung δY_j . Diese Information wird zur Bereitstellung eines Schätzwertes $\text{var}(\delta Y_j)$ der Varianz der Abweichung δY_j benötigt. Details zur Varianzschätzung auf der Basis von fachkundigen Beurteilungen (Ermittlungsmethode B) werden in 8.3 beschrieben. Eine Auswertung auf Basis der Ermittlungsmethode B sollte eine Auswertung auf Basis der Ermittlungsmethode A nur ergänzen.

Anstelle einer direkten Schätzung des maximalen Wertes $\max(\delta Y_j)$ einer möglichen Abweichung δY_j kann es manchmal zweckmäßig sein, die maximale Abweichung indirekt mit Hilfe der Gleichung (1) zu schätzen:

$$\max(\delta Y_j) = c_j \cdot \max(\delta X_j) \quad (1)$$

In diesem Fall kennzeichnet δX_j eine mögliche Abweichung der betrachteten Einflussgröße x_j vom festgelegten Referenzwert. Die Größe c_j ist der Empfindlichkeitskoeffizient des Messverfahrens in Bezug auf die Änderung dieser Einflussgröße.

ANMERKUNG Der Empfindlichkeitskoeffizient c_j kann in separaten Untersuchungen ermittelt werden, beispielsweise im Rahmen der Verfahrensvalidierung.

Typische Einflüsse, die manchmal nicht durch eine Reihe von Beobachtungen in einer repräsentativen Weise beschrieben werden können, sind in Tabelle 2 beschrieben (ohne Anspruch auf Vollständigkeit).

Eine zusätzliche Abweichung δY_j darf vernachlässigt werden, wenn der entsprechende Schätzwert für die Varianz $\text{var}(\delta Y_j)$ weniger als 5 % zum Schätzwert der in der Unsicherheitsermittlung verwendeten Varianz $\text{var}(Y)$ beiträgt.

Tabelle 2 — Einflüsse, die eine separate Beurteilung benötigen

Nr.	Einfluss	Beurteilung möglicher Einflüsse auf das Messergebnis
1	Probenahmewirkungsgrad F_{sam} , der bei der Kalibrierung nicht korrigiert wird	$\delta \Psi_{\text{sam}} = y (1 - F_{\text{sam}})$
2	Extraktionswirkungsgrad F_{ext}	$\delta \Psi_{\text{ext}} = y (1 - F_{\text{ext}})$
3	Änderung der Umgebungstemperatur T	$\delta Y_T = c_T \delta T$
4	Änderung des Luftdrucks P	$\delta Y_P = c_P \delta P$
5	Änderung der Umgebungsfeuchte H	$\delta Y_H = c_H \delta H$
6	Änderung der Zusammensetzung der gesammelten Luft Y_{INT}	$\delta Y_{\text{INT}} = c_{\text{INT}} Y_{\text{INT}}$
7	Änderung der Netzspannung V	$\delta Y_V = c_V \delta V$

7 Statistische Analyse

7.1 Ziel

Das Ziel der statistischen Analyse im Rahmen der Unsicherheitsermittlung ist die Bereitstellung einer mathematischen Grundlage für die Berechnung eines Schätzwertes $\text{var}(Y)$ der Varianz der Verteilung möglicher Messergebnisse Y , die vernünftigerweise derselben Messgröße durch unabhängige Wiederholung der Messung, die zur Ermittlung des Messergebnisses y durchgeführt wurde, zugeordnet werden könnte. Auf der Basis dieses Schätzwertes der Varianz wird die (kombinierte) Standardunsicherheit $u(y)$ des Messergebnisses y schließlich als $u(y) = \sqrt{\text{var}(Y)}$ berechnet.

Diese Internationale Norm liefert eine Anleitung zur statistischen Analyse, die ohne Fachkenntnisse der statistischen Modellierung von Messprozessen anwendbar ist. Die statistische Modellierung im Rahmen der Unsicherheitsermittlung wird durch die getrennte Betrachtung des indirekten und direkten Ansatzes erheblich vereinfacht. Obwohl sich die Empfehlungen des GUM explizit auf den komplexeren indirekten Ansatz beziehen, gelten sie auch für den mathematisch viel einfacheren direkten Ansatz. Im Gegensatz zum indirekten Ansatz verwendet der direkte Ansatz eine einzelne Reihe von beobachteten Messergebnissen, die als Eingangsdaten bereitgestellt werden.

Die geeignete statistische Modellgleichung ist abhängig

- vom Ansatz zur Untersuchung der Streuungen und des Bias, die das Messverfahren zeigt,
- vom Experiment zur Durchführung dieses Ansatzes,
- von der Reihe von Beobachtungen, die als Eingangsdaten bereitgestellt werden, und
- von der Repräsentativität der Eingangsdaten.

Auf der Basis der statistischen Modellgleichung wird mit Hilfe des Gesetzes der Unsicherheitsfortpflanzung eine geeignete Gleichung zur Schätzung $\text{var}(Y)$ ermittelt.

Wenn der Unsicherheitsparameter die Überdeckungswahrscheinlichkeit p eines festgelegten Intervalls $[y - U_p(y); y + U_p(y)]$ um ein Messergebnis y ist, kann die statistische Analyse entsprechend der Beschreibung in 9.3 erheblich vereinfacht werden.

Tabelle 3 verdeutlicht die Unterschiede zwischen dem direkten und dem indirekten Ansatz des 5-stufigen Verfahrens zur Unsicherheitsermittlung.

Tabelle 3 — Elemente der Unsicherheitsermittlung beim direkten und indirekten Ansatz

Schritt	Element	Direkter Ansatz	Indirekter Ansatz
1	Problembeschreibung		
	Experiment	ein Experiment, z. B. vom Typ A1 bis A8	mehrere Experimente, z. B. vom Typ A1 bis A8
	Eingangsdaten	eine einzelne Reihe von Beobachtungen und Referenzwerte der Messgröße y Siehe 6.4.	Reihen von Beobachtungen der Eingangsgrößen x_i oder Schätzwerte von x_i und $\text{var}(x_i)$ für jede Eingangsgröße x_i Siehe 6.4.
	Zusätzliche Abweichungen	$\min(\delta Y_j) \leq \delta Y_j \leq \max(\delta Y_j)$, falls zutreffend	$\min(\delta Y_j) \leq \delta Y_j \leq \max(\delta Y_j)$, falls zutreffend
2	Statistische Analyse		
	Methodenmodellgleichung	$y = f(x_1, x_2, \dots)$, falls verfügbar	$y = f(x_1, x_2, \dots)$
	Statistische Modellgleichung	$Y = y + \delta Y$	$Y = f(x_1, x_2, \dots) + \delta Y$
	Varianzgleichung	$\text{var}(Y) = \text{var}(y) + \text{var}(\delta Y)$ Siehe 7.3.	$\text{var}(Y) = c_1^2 \text{var}(x_1) + c_2^2 \text{var}(x_2) + \dots$ $+ 2 c_1 c_2 \text{cov}(x_1, x_2) + \dots$ $+ \text{var}(\delta Y)$ Siehe 7.2.
3	Schätzung der Varianzen und Kovarianzen		
	Typ A	$\text{var}(y) = u^2(y)$ Siehe 8.2 und Anhang B.	$\text{var}(x_i) = u^2(x_i)$ Siehe 8.2 und Anhang B.
	Typ B	$\text{var}(\delta Y) = \dots$ Siehe 8.3.	$\text{var}(\delta Y) = \dots$ Siehe 8.3.
	Kovarianzen	Siehe 8.4.	Siehe 8.4.

Tabelle 3 (fortgesetzt)

Schritt	Element	Direkter Ansatz	Indirekter Ansatz
4	Ermittlung der Unsicherheitsparameter		
	(kombinierte) Standard-unsicherheit	$u(y) = \sqrt{\text{var}(Y)}$	$u(y) = \sqrt{\text{var}(Y)}$
	Erweiterte Messunsicherheit	$U_p(y) = k_p(v) \cdot u(y)$ Siehe 9.2.	$U_p(y) = k_p(v) \cdot u(y)$ Siehe 9.2.
5	Dokumentation		

Obwohl Y im GUM als Messgröße bezeichnet wird, stellt oft Y im mathematischen Kontext des GUM eine Zufallsvariable dar, die ein „mögliches Messergebnis“ beschreibt. Das Formelzeichen Y darf nicht mit dem unbekannten aber eindeutigen Wert μ der untersuchten Messgröße verwechselt werden. Das grundlegende Messkonzept erfordert, dass die Messgröße zumindest für die Zeitdauer, die durch ein einzelnes Messergebnis definiert ist, einen eindeutigen Wert aufweist.

7.2 Indirekter Ansatz

Bei einem indirekten Ansatz werden in einem ersten Schritt die Streuungen und systematische Messabweichungen für die Eingangsgrößen x_i der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$, die zur Berechnung der Messergebnisse y verwendet wird, getrennt ermittelt. Die folgenden Daten können als Eingangsdaten verwendet werden:

- Reihen von Beobachtungen von Eingangsgrößen x_i , die beispielsweise in Experimenten vom Typ A1 bis A8 ermittelt werden;
- durch externe Quellen bereitgestellte Schätzwerte von x_i und $\text{var}(x_i)$, wie Größen in Verbindung mit kalibrierten Messnormalen, zertifizierte Referenzmaterialien, Referenzdaten aus Handbüchern und Daten über die Vergleichspräzision und Richtigkeit.

ANMERKUNG Die Verwendung externer Daten über die Vergleichspräzision und Richtigkeit bei der Unsicherheitsermittlung wird in ISO/TS 21748 [9] beschrieben.

Zusätzliche Abweichungen δY_j können durch Einflüsse, die nicht durch eine Reihe von Beobachtungen repräsentiert werden, verursacht werden. Wenn es notwendig ist, können diese Abweichungen durch fachkundige Beurteilungen und Auswertungen nach Ermittlungsmethode B festgestellt werden.

Unter diesen Bedingungen wird eine geeignete statistische Modellgleichung für die Unsicherheitsermittlung durch Gleichung (2) in allgemeiner Form beschrieben:

$$Y = f(x_1, \dots, x_K) + \sum_{j=1}^M \delta Y_j \quad (2)$$

Dabei ist

- Y ein mögliches Messergebnis;
- x_i eine Eingangsgröße der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$, die zur Berechnung des Messergebnisses y verwendet wird;
- δY_j eine zusätzliche Abweichung des Messergebnisses y , die nicht durch die Reihen von Beobachtungen der Eingangsgröße x_i repräsentiert wird.
- K die Anzahl der Eingangsgrößen der Methodenmodellgleichung;
- M die Anzahl der zusätzlichen Abweichungen, die nach Ermittlungsmethode B zu schätzen sind.

Eine zusätzliche Abweichung δY_j muss in der durch Gleichung (2) beschriebenen statistischen Modellgleichung berücksichtigt werden, wenn die entsprechende Varianz $\text{var}(\delta Y_j)$ mindestens 5 % zu der in Gleichung (3) beschriebenen Varianz $\text{var}(Y)$ der Verteilung beiträgt. Anderenfalls darf die Abweichung δY_j in Unsicherheitsermittlung vernachlässigt werden.

In einem zweiten Schritt ist das Gesetz der Unsicherheitsfortpflanzung auf die durch Gleichung (2) beschriebene statistische Modellgleichung anzuwenden. Dies liefert den Schätzwert der Varianz $\text{var}(Y)$ in Form der durch Gleichung (3) beschriebenen Varianzsummengleichung:

$$\text{var}(Y) = \sum_{i=1}^K c_i^2 \text{var}(x_i) + 2 \sum_{i=1}^K \sum_{j=i+1}^K c_i c_j \text{cov}(x_i, x_j) + \sum_{j=1}^M \text{var}(\delta Y_j) \quad (3)$$

Dabei ist

$\text{var}(Y)$ der Schätzwert der Varianz möglicher Messergebnisse Y ;

c_i der Empfindlichkeitskoeffizient in Bezug auf Streuungen der Eingangsgröße x_i ;

$\text{var}(x_i)$ ein Schätzwert der Varianz der Eingangsgröße x_i ;

$\text{cov}(x_i, x_j)$ ein Schätzwert der Kovarianz zwischen den Eingangsgrößen x_i und x_j ;

$\text{var}(\delta Y_j)$ ein Schätzwert der Varianz zusätzlicher Abweichungen δY_j .

Formal ist der Empfindlichkeitskoeffizient c_i die partielle Ableitung der Methodenmodellgleichung $y = f(x_1, \dots, x_K)$ nach Gleichung (4):

$$c_i = \frac{\partial f(x_1, \dots, x_K)}{\partial x_i} \quad (4)$$

In der Praxis kann ein Empfindlichkeitskoeffizient c_i auf verschiedene Weise ermittelt werden:

- durch Anwendung algebraischer Regeln;
- durch numerische Berechnung der Ableitung;
- als Mittelwert des Verhältnisses der beobachteten Änderungen $\Delta y(j)$ des Messergebnis zur Änderung $\Delta x_i(j)$, die die beobachtete Änderung $\Delta y(j)$ verursacht. In diesem Fall gilt Gleichung (5):

$$c_i = \sum_{j=1}^N \frac{[\Delta y(j) / \Delta x_i(j)]}{N} \quad (5)$$

Schätzwerte für die Varianz $\text{var}(x_i)$ in Gleichung (3) müssen entweder im Rahmen einer Auswertung nach Ermittlungsmethode A, die für das Experiment zur Ermittlung der Eingangsdaten geeignet ist, ermittelt werden oder durch Verweis auf externe Quellen. Auswertungen nach Ermittlungsmethode A für die Experimente vom Typ A1 bis A8 werden im Anhang B detailliert beschrieben.

Der Schätzwert der Varianz $\text{var}(\delta Y_j)$ der Abweichungen δY_j muss mit Hilfe einer in 8.3 beschriebenen Ermittlungsmethode B berechnet werden.

Kovarianzen $\text{cov}(x_i, x_j)$ sind als null anzusehen, wenn die Reihen von Beobachtungen, die für die Eingangsgrößen x_i und x_j bereitgestellt werden, voneinander unabhängig in getrennten Experimenten ermittelt wurden. Andernfalls müssen die Schätzwerte der Kovarianzen $\text{cov}(x_i, x_j)$ mit einer in 8.4 beschriebenen Methode berechnet werden.