

ME 7-1 : Description des résultats

- Propagation des cofacteurs
 - Cofacteurs des résidus compensés, $Q_{\hat{v}\hat{v}}$
 - Cofacteurs des observations compensées, $Q_{\hat{\ell}\hat{\ell}}$
- Triangle avec mesure des angles
 - Calcul des cofacteurs
 - Interprétation
 - Diagonale et écarts-types
 - Corrélations
- Ecart-type *a posteriori* $\hat{\sigma}_0$
 - Espérance de la forme quadratique et forme quadratique effective
 - Estimation de la variance
 - Application au triangle



Nous avons réussi, nous avons des résidus et des observations compensées ! (La dernière fois)

■ Rappel: pourquoi compenser? (*polycopié, page viii*)

- *Optimiser* les mesures (et les modèles)
- *Détecter* une faute
- *Estimer* la précision
- *Améliorer* les résultats



Ensemble (pour observations) :
« **ODE A LA JOIE** » ..

■ Aujourd'hui :

- Comment *estimer* la précision ?

- Des résidus ?

$$\hat{v}$$

$$\hat{v} \leftarrow Q_{\hat{v}\hat{v}}$$

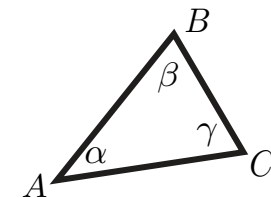
- Des observations compensées ?

$$\hat{\ell} \leftarrow Q_{\hat{\ell}\hat{\ell}}$$

- (jeudi) Ecart-type *a posteriori* ?

$$\hat{\sigma}_0$$

- Comment les appliquer au problème connu? (p.ex. au triangle)



6. Estimation de précision (en peut différemment que dans le Chap. 3.3)

- Rappel des « ingrédients » au départ:
 - les conditions $\mathbf{f}(\ell)$ d'observation ℓ , avec leur écarts de fermeture $\mathbf{w} = \mathbf{f}(\ell)$
 - forme linéaire des conditions $\mathbf{B} = \partial \mathbf{f}(\ell) / \partial \ell$,
 - modèle stochastique des observations $\mathbf{Q}_{\ell\ell}$
- Rappel des résultats:
 - équation (3.10) qui relie les mesures dans le modèle fonctionnel (écarts de fermeture $\mathbf{w}$) et le modèle stochastique avec les résidus compensés $\hat{\mathbf{v}}$

$$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \cdot \mathbf{w} \quad (3.10)$$

- correction de observations:

$$\hat{\ell} = \ell - \hat{\mathbf{v}} \quad (3.11)$$

7. Estimation de précision (en peut différemment que dans le Chap. 3.3)

- L'idée principale :

1. Faire usage d'équation (3.10) , qui relie les mesures ℓ dans le modèle fonctionnel (écartes de fermeture) et le modèle stochastique avec les résidus compensés

$$g(\mathbf{w}, \mathbf{B}, \mathbf{Q}_{\ell\ell}) \longrightarrow \hat{\mathbf{v}}$$

$$\hat{\mathbf{v}} = \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1}}_{g(\cdot)} \cdot \mathbf{w} \quad (3.10)$$

2. Appliquer la propagation de variance pour cette fonction

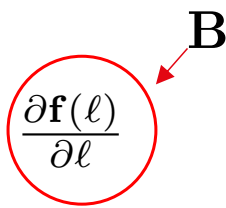
- En d'autres termes : si ℓ change (un peu), comment $\hat{\mathbf{v}}$ change?
 - Mathématiquement on pourrait exprimer ça comme: $\frac{\delta \hat{\mathbf{v}}}{\delta \ell} = \frac{\partial g(\ell)}{\partial \ell}$
 - Quelle partie de (3.10) dépend de ℓ ?

8. Estimation de précision des résidus

- En d'autres termes : si ℓ change, comment $\hat{\mathbf{v}}$ change?
 - Nous admettons que $\mathbf{w}$ dépend de ℓ , car $\mathbf{w} = \mathbf{f}(\ell)$
 - $\mathbf{B}$ dépend également de ℓ , mais *seulement au deuxième ordre* ... que nous ignorons!

1. Alors si $\hat{\mathbf{v}} = \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1}}_{\mathbf{G}} \cdot \mathbf{w}$

2. Leur variation par rapport d' ℓ : $\frac{\delta \hat{\mathbf{v}}}{\delta \ell} = \mathbf{G} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}(\ell)}{\partial \ell}$



$$\longrightarrow \delta \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{B} \delta \ell$$

- Donne la relation de base pour la propagation de la variance

9. Estimation de précision des résidus

- Appliquer la propagation de variance au $\delta \hat{\mathbf{v}} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{B} \delta \ell$

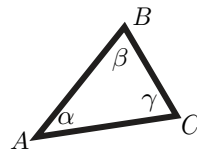
- En générale : $\mathbf{Q}_{yy} = \mathbf{F} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{F}^T$

- En particulier (ici) : $\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \underbrace{\mathbf{G} \mathbf{B}}_{\mathbf{F}} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \underbrace{\mathbf{B}^T \mathbf{G}^T}_{\mathbf{F}^T}$

$$\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1}}_{\mathbf{G}} \cancel{(\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)} \cancel{(\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1}} \underbrace{\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell}}_{\mathbf{G}^T}$$

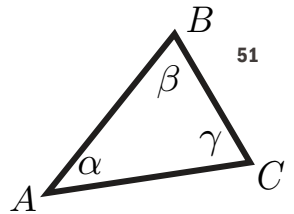
$$\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell}$$

- Comment l'appliquer ?
 - Exemple de triangle ...



Exemple de triangle en compensation conditionnelle

$$\begin{aligned} \ell_\alpha &= 61.341 \text{ gon} \\ \ell_\beta &= 99.658 \text{ gon} \\ \ell_\gamma &= 38.986 \text{ gon} \end{aligned}$$



■ Estimation de précision des résidus

- Modèle stochastique $\mathbf{Q}_{\ell\ell} = \mathbf{I}_3$
- Résidus compensés (dernière fois)
- Cofacteurs des résidus compensés

$$\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{I}_3 \cdot \overbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}}^{\mathbf{B}^T} (\mathbf{I}_3)^{-1} \cdot \mathbf{w} = \begin{bmatrix} w/3 \\ w/3 \\ w/3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Q}_{\ell\ell}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} (\mathbf{I}_3)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

• Interprétation $\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}}$

- Diagonal $q_{\hat{v}_\alpha}^2 = q_{\hat{v}_\beta}^2 = q_{\hat{v}_\gamma}^2 = \frac{1}{3} \longrightarrow \sigma_{\hat{v}_\alpha} = \sigma_{\hat{v}_\beta} = \sigma_{\hat{v}_\gamma} = \frac{1}{\sqrt{3}}$
- Hors diagonal (p. ex.)

$$q_{\hat{v}_\alpha} q_{\hat{v}_\beta} = \frac{1}{\sqrt{1}\sqrt{1}} = 1 \longrightarrow 100\%$$
- - les résidus compensés sont égaux, dont entièrement corrélés.

Compensation conditionnelle

10. Estimation de précision de observations compensées

- Selon (3.11) : $\hat{\ell} = \ell - \hat{v}$

1. Variation

$$\delta \hat{\ell} = \underbrace{\left(\mathbf{I} - \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B}}_{\mathbf{G}} \right)}_{\mathbf{H}} \delta \ell$$

2. Cofacteurs

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\hat{\ell}\hat{\ell}} &= \mathbf{H} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{H}^T \\ &= \left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B}^T \right) \mathbf{Q}_{\ell\ell} \left(\mathbf{I} - \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \right) = \dots \\ &\dots = \mathbf{Q}_{\ell\ell} - \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell}}_{\mathbf{Q}_{\hat{v}\hat{v}}} \end{aligned}$$

avant compensation

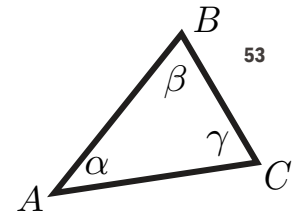
$$\mathbf{Q}_{\ell\ell} = \mathbf{Q}_{\hat{\ell}\hat{\ell}} + \mathbf{Q}_{\hat{v}\hat{v}}$$

après compensation

- En langage simplifié $\Rightarrow \mathbf{Q}_{\hat{\ell}\hat{\ell}} \ll \mathbf{Q}_{\ell\ell}$

objectif atteint: améliorer les résultats!

Exemple de triangle en compensation conditionnelle



- Estimation de précision des observations compensées:

- Pour des résidus compensés

$$\mathbf{Q}_{\hat{v}\hat{v}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Q}_{\ell\ell} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- Pour les observations compensées

$$\mathbf{Q}_{\hat{\ell}\hat{\ell}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} - \mathbf{Q}_{\hat{v}\hat{v}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

- Interprétation $\mathbf{Q}_{\hat{\ell}\hat{\ell}}$

- Diagonal

$$q_{\hat{\ell}_\alpha}^2 = q_{\hat{\ell}_\beta}^2 = q_{\hat{\ell}_\gamma}^2 = \frac{2}{3} \longrightarrow \sigma_{\hat{\ell}_\alpha} = \sigma_{\hat{\ell}_\beta} = \sigma_{\hat{\ell}_\gamma} = \sqrt{\frac{2}{3}} \sigma_{\ell_i}$$

- Hors diagonal (p. ex.)

$$q_{\hat{\ell}_\alpha} q_{\hat{\ell}_\beta} = \frac{-1}{\sqrt{2}\sqrt{2}} = -\frac{1}{2} \longrightarrow -50\%$$

- Pourquoi?

Si l'un des angles d'un triangle augmente d'un certain montant, les deux autres doivent être réduits (de la moitié de ce montant chacun) pour respecter la condition !

- Estimation de précision (en peut différemment que dans le Chap. 3.3)
 - A partir d'une solution pour:
 - Les résidus compensés
 - Les observations compensées
 - Nous avons appliqué nos connaissances acquises (dans Block I de ME) pour obtenir des nouvelles relations permettant d'estimer
 - Précision des résidus compensés
 - Précision des observations compensées
 - Jeudi
 - Écarte type a posteriori (Ch. 3.4 - lire avant, 1p.) $\hat{\sigma}_0$
 - Quotient d'erreur moyenne (Ch. 3.5 – lire avant, 1.p.) $\hat{\sigma}_0/\sigma_0$
 - Analyse des résultats en pratique (exercice)

ME : À quoi ça sert ? Chimie computationnelle



Improving Data Quality for Environmental Fate Models: A Least-Squares Adjustment Procedure for Harmonizing Physicochemical Properties of Organic Compounds

URS SCHENKER, MATTHEW MACLEOD,
MARTIN SCHERINGER,* AND
KONRAD HUNGERBÜHLER

*Safety and Environmental Technology Group, Swiss Federal
Institute of Technology, ETH Hönggerberg, CH-8093 Zürich,
Switzerland*

Environ. Sci. Technol. **2005**, *39*, 8434–8441

Introduction

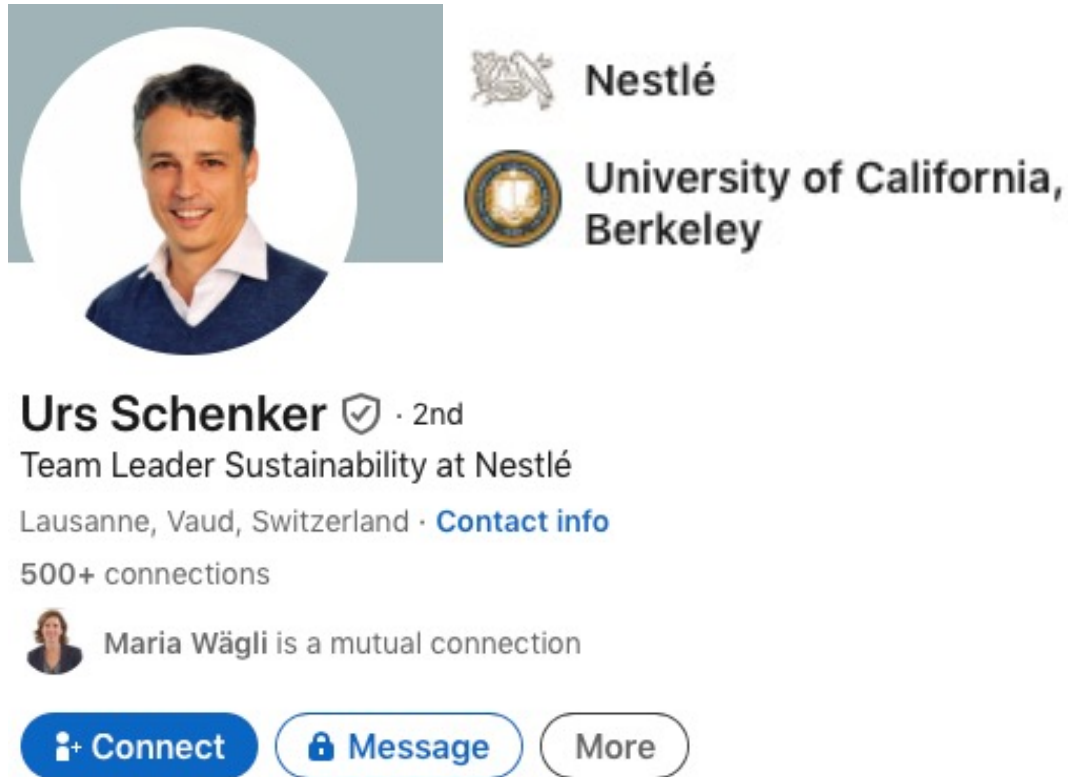
The distribution of organic compounds in environmental media is a key factor in determining their fate and effects. For a system, the partitioning can be described by the partition coefficients: solubilities, vapor pressure, and solubility in octanol. (R is the gas constant, T is the temperature.) If ideal solution behavior is assumed, the ratios of these coefficients are constant: the air–water partition coefficient, the air–octanol partition coefficient, and the octanol–water partition coefficient. Accurate measurements of these coefficients is a challenge for chemicals that have low volatility and low solubility in water.

Accurate measurements of these coefficients is a challenge for chemicals that have low volatility and low solubility in water.

ME : À quoi ça sert ?

Chimie computationnelle

real life après ME ...



Profile of Urs Schenker, Team Leader Sustainability at Nestlé. The profile includes a circular portrait of a man with short dark hair wearing a blue sweater over a white shirt. To the right of the portrait are logos for Nestlé and the University of California, Berkeley. Below the portrait, the name 'Urs Schenker' is followed by a verified badge and '· 2nd'. His title is 'Team Leader Sustainability at Nestlé' and his location is 'Lausanne, Vaud, Switzerland'. A 'Contact info' link is present. It shows '500+ connections' and a mutual connection with Maria Wägli. At the bottom are buttons for 'Connect', 'Message', and 'More'.

- MSc EPFL 2003 (SIE)
- PhD ETHZ

(The function Ω is called the Lagrangian, and $2k$ is the Lagrange multiplier.)

$$\Omega = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 - 2k(v_1 - v_2 + v_3 - w) \quad (11)$$

The minimizing condition is that the partial derivatives of Ω with respect to all v_i are equal to 0. This condition is fulfilled by

$$v_1 = -v_2 = v_3 = k = \frac{w}{3} \quad (12)$$

... retour à ME -- **Exo 7+8 !**

Compensation conditionnelle programmation pour l'analyse

■ Usage des matrices auxiliares – pour *simplifier* des calculs

• résidus compensés

- `Aux1 = Kll @ np.transpose(B)`
- `Aux2 = Aux1 @ np.linalg.inv(B @ Aux1)`
- `vcomp = Aux2 @ w`

$$\hat{\mathbf{v}} = \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T}_{\text{Aux1}} \underbrace{(\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1}}_{\text{Aux1}} \cdot \mathbf{w}$$

• covariance des résidus compensés

- `Kvcomp = Aux2 @ np.transpose(Aux1)`

$$\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \underbrace{\mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1}}_{\text{Aux2}} \underbrace{\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell}}_{(\text{Aux1})^T}$$

• covariance des observations comp.

- `Klcomp = Kll - Kvcomp`

$$\mathbf{Q}_{\hat{\ell}\hat{\ell}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} - \mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}}$$

■ Usage de fonctions auxiliaires – pour *simplifier* l'interprétation

• écart-types, matrice de corrélation

- `[sigmavcomp, Rvcomp] = covmat2cormat(Kvcomp)`
- `print('\n', 'sigmavcomp =', '\n', sigmavcomp)`
- `print('\n', 'Rvcomp =', '\n', Rvcomp)`

$$\sigma_{v_i}, \mathbf{R} \leftarrow \mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}}$$

Compensation conditionnelle programmation pour l'analyse

- Observations de types différents

- on renonce souvent à l'utilisation de cofacteurs
- Implicitement, $\sigma_0 = 1$
- dans cette situation

- `P = np.linalg.inv(Kll)`

$$\mathbf{P} = \mathbf{K}_{\ell\ell}^{-1}$$

- Quotient d'erreur moyenne

- théorie chapitre 3.2 et 3.3 (plus tard)
- résultats de la minimisation globale
- le rapport global des écarts-types a posteriori / a priori pour tous les types de mesures

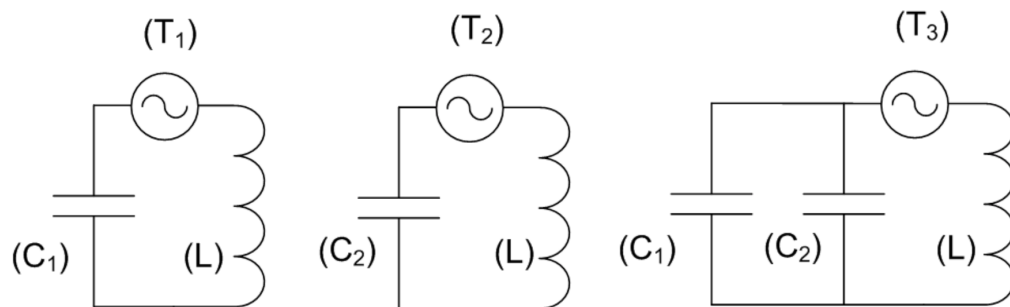
$$\frac{\hat{\sigma}_0}{\sigma_0} = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{K}_{\ell\ell}^{-1} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$$

- `Qglob = np.sqrt((np.transpose(vcomp) @ P @ vcomp) / r)`

Compensation conditionnelle

circuit oscillant – ex. 8

- But: déterminer la capacité de deux condensateurs (C_1 et C_2) avec les mesures différentes



$$T_i = 2\pi\sqrt{L \cdot C_i}$$

$$L = \text{const.}$$

mesures \ circuit	1	2	3
Capacités	C_1	C_2	$(C_1 + C_2)$
Périodes	T_1	T_2	T_3

Compensation conditionnelle circuit oscillant – ex. 8

- Procédé de base:

1. sur papier *svp* à formuler !

- les observations (vecteur) et leur modèle stochastique (matrice)
- les conditions
- les conditions en forme linéaire?

2. vérifier (avec le code résolue)

3. interpréter les résultats

- différences entre C_i compensés et C_i mesurés en direct
- écart-type de valeurs compensés C_i
- corrélation des valeurs compensées C_i
- quotient global

Compensation conditionnelle circuit oscillant – ex. 8

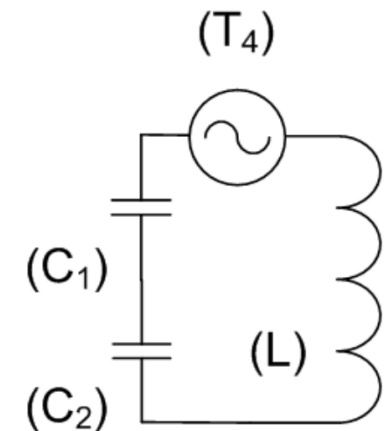
- Procédé des modifications :

1. Ajouter une mesure de période (circuit 4)

- en adaptant *sur papier*
- *Attention:* $\frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2}$
- en adaptant le code!

2. Considérer L comme observation (dans les circuits 1-4)

- en adaptant *sur papier*
- en adaptant le code!



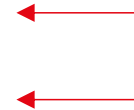
Ecarte-type *a posteriori*

- Rappel (statistique de base)

- Incertitude de la moyenne $\bar{y}$

- Estimateur non-biaisé

$$s = \sigma_{\bar{y}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{(n-1)}}$$



- Compensation conditionnelle

- Différences

- d'autre type des conditions
- les observations pas avec la même précision

$$\hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$$

- Similitudes

- minimum – **somme des résidus carrés**
- **surdétermination** – (pour la moyenne $r = n - 1$)

$$\Omega = \mathbf{v}^T \mathbf{P} \mathbf{v} \longrightarrow \min.$$

Ecarte-type *a posteriori*

- Principe idée de dérivation
 - Résultat $\hat{\Omega} = \hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}}$
- On espère obtenir $E\{\hat{\Omega}\} = E\{trace(\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}})\} = \dots$
 - On fait usage de
 - la trace - un opérateur commutatif
 - $\mathbf{P}$ – pas stochastique $\rightarrow$ à l'extérieur d'espérance
 - $E\{\hat{\mathbf{v}}^T \hat{\mathbf{v}}\} = \mathbf{K}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}}$
 - $\mathbf{K}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \sigma_0^2 \cdot \mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}}$
 - $\mathbf{Q}_{\hat{\mathbf{v}}\hat{\mathbf{v}}} = \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Q}_{\ell\ell}$
 - $\mathbf{P} = \mathbf{Q}_{\ell\ell}^{-1}$
 - $\dots = \sigma_0^2 \cdot trace((\mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T)^{-1} \cdot \mathbf{B} \mathbf{Q}_{\ell\ell} \mathbf{B}^T) = \sigma_0^2 \cdot trace(\mathbf{I})$
 - $= \sigma_0^2 \cdot r$
 - Si le résultat = espérance $\implies \hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$

Quotient global $\frac{\hat{\sigma}_0}{\sigma_0}$

- Erreur moyenne
 - sans dimension!
- Indique
 - sont le(s) modèle(s) et les observations adéquate ?
 - Avec sigma0 / poids unitaires

$$\frac{\hat{\sigma}_0}{\sigma_0} = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{K}_{\ell\ell}^{-1} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$$

> 1 ■ trop optimiste

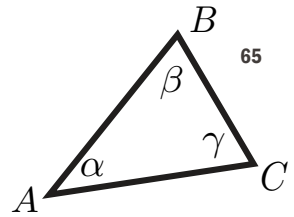
< 1 ■ trop pessimiste

- Comment ?

- $\implies \hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$
- $\hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{Q}_{\ell\ell}^{-1} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$
- $\hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \sigma_0^{-2} \mathbf{K}_{\ell\ell}^{-1} \hat{\mathbf{v}}}{r}}$

Analyse - exemple de triangle

$$\begin{aligned}\ell_\alpha &= 61.341 \text{ gon} \\ \ell_\beta &= 99.658 \text{ gon} \\ \ell_\gamma &= 38.986 \text{ gon}\end{aligned}$$



■ Avant

$$\begin{bmatrix} \hat{v}_\alpha \\ \hat{v}_\beta \\ \hat{v}_\gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w/3 \\ w/3 \\ w/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ 5 \end{bmatrix} \text{ mgon}$$

$$\hat{\sigma}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}}}{r}} = \sqrt{\frac{w^2}{3}} = \frac{|w|}{\sqrt{3}} = \frac{15}{1.732} = 8.6 \text{ mgon}$$

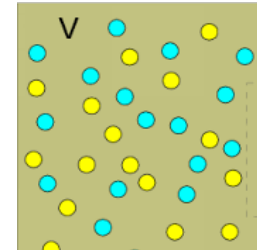
- je le compare à quoi?
- sigma0 n'est suivant pas définit explicitement ...
- ... alors je fais quoi?

ME 7-2 : Description des résultats

- Préférer sigma *a priori* (σ_0) ou *a posteriori* ($\hat{\sigma}_0$) ?
 - Préanalyse : pas de valeur *a posteriori* (seulement σ_0)
 - Nouveau procédé : pas de valeur *a priori*
 - Quelle valeur exprime la meilleure connaissance ?
- Quotient d'erreur moyenne
 - Ecart-type *a posteriori* pour $P = K_{\ell\ell}^{-1}$, donc pour $\sigma_0 = 1$
 - Dans la forme quadratique, les unités des résidus et des poids s'annulent
 - Utile surtout pour des mesures de types différents
 - Exemple connu : quotient global ($\hat{\sigma}_0/\sigma_0$) le gaz parfait
- Triangle avec mesure des angles et de côtés
 - Exemple du photocopié, pp. 57-60



ME 7-3 : Gaz parfait - suite



- 2em étape : modèle stochastique des résultats
 - `Sigmavcomp` et `Rvcomp`, `sigmalcomp` et `Rlcomp`, `QuotientGlobal`
- 3em étape : autre modèle stochastique $K_{\ell\ell}$
 - Modifier σ_p , σ_V ou σ_T et observer les changements sur $\hat{v}$, $R_{\hat{v}\hat{v}}$, $\hat{\sigma}_0/\sigma_0$
- Fonction des observations compensées $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\hat{\ell})$
 - Exemple : estimer la constante du gaz : $c = P \cdot V/T$ et σ_c
 - Option : estimer c et σ_c par pondération

Alternative partielle à la pondération des observations :

 - calculer $c_i = \ell_{p_i} \cdot \ell_{V_i} / \ell_{T_i}$ et σ_{c_i} pour chaque état, puis pondérer

Cas spécial: erreurs relatives constantes pour $P, V, T \longrightarrow$ moyenne arithmétique