

MANUEL DE L'UTILISATEUR



Version 2

Catherine Yardin

Décembre 2022



Laboratoire national de métrologie et d'essais

Établissement public à caractère industriel et commercial • Siège social : 1, rue Gaston Boissier - 75724 Paris Cedex 15 • Tél. : 01 40 43 37 00
Fax : 01 40 43 37 37 • E-mail : info@lne.fr • Internet : www.lne.fr • Siret : 313 320 244 00012 • NAF : 7120B • TVA : FR 92 313 320 244
CRCA PARIS C.AFF.RENNES - IBAN : FR76 1820 6002 8058 3819 5600 104 - BIC : AGRIFRPP882

Avant-propos

LNE-RegPoly estime un polynôme $y = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_kx^k$ avec n couples de points (x_i, y_i) en tenant compte des incertitudes associées à ces points. Puis, il utilise le polynôme pour déduire une nouvelle valeur de x connaissant y (ou vice versa). Dans la première étape, il propage les incertitudes des points aux coefficients du polynôme ; dans la deuxième étape, celles des coefficients du polynôme et du prédicteur à la prévision.

Dans le cas d'un instrument de mesure, où le polynôme représente la fonction d'étalonnage :

- les points sont les couples (valeur-étalon, indication) ou (correction, indication)
- le sens de modélisation est choisi par l'utilisateur :

$$\text{valeur_étalon} = f(\text{indication}) \text{ ou } \text{indication} = f(\text{valeur_étalon})$$

- le résultat de mesure est calculé suivant le cas en mode :

$$\text{direct} : y_0 = f(\text{indication})$$

$$\text{inverse} : x_0 = f^{-1}(\text{indication})$$

- l'indication peut comporter une incertitude à propager au résultat.

LNE-RegPoly propose trois méthodes d'estimation type régression pondérée : WLS (moindres carrés pondérés), GLS_simples (moindres carrés généralisés) et GLS_GGMR (moindres carrés généralisés avec incertitude sur x). Il intègre également la méthode de base des OLS (moindres carrés ordinaires). L'utilisateur sélectionne une méthode cohérente avec les incertitudes associées aux valeurs x_i et y_i .

Plus généralement, LNE-RegPoly permet :

- d'estimer une fonction reliant deux variables qui sont entachées d'incertitude,
- de calculer des prévisions en mode direct ou inverse,
- de propager les incertitudes de la fonction et du prédicteur, à la prévision.

LNE-RegPoly comporte 2 fenêtres (fenêtre d'accueil, fenêtre de calcul). La navigation dans le logiciel s'effectue via des boutons de commande ou des listes de choix. Les entrées et les sorties du logiciel se font directement dans l'interface ou par l'intermédiaire de fichiers Excel.

TABLE DES MATIERES

1	INFORMATIONS GENERALES	4
2	FENETRE D'ACCUEIL	4
3	FENETRE DE CALCUL	4
	3.1 - Données étalonnage (Panneau I)	5
	3.1.1 - Structure du fichier de données et des feuilles Excel	5
	3.1.2 - Validation des données	7
	3.1.3 - Actions	7
	3.2 - Degré du polynôme (Panneau II)	8
	3.3 - Méthode d'estimation (Panneau III)	9
	3.3.1 - Caractéristiques des méthodes programmées dans le logiciel	9
	3.3.2 - Actions	9
	3.3.3 - Incompatibilité entre la méthode sélectionnée et l'incertitude des données	9
	3.4 - Estimations des coefficients du polynôme (panneau IV)	10
	3.4.1 - Résultats de l'estimation	10
	3.4.2 - Résidus et analyse des résultats	11
	3.5 - Prévisions (Panneau V)	11
	3.5.1 - Généralités	11
	3.5.2 - Prédicteurs x_0 et y_0	12
	3.5.3 - Calcul des prévisions avec leurs incertitudes	13
4	ENREGISTRER LES ESTIMATIONS ET LES PREVISIONS DANS UN FICHIER EXCEL	15
	4.1 - Généralités	15
	4.2 - Fichier de sauvegarde des résultats (de l'estimation)	15
	4.3 - Fichier de sauvegarde des prévisions	17
5	AUTRES ACTIONS	19
6	EXEMPLE	19
	6.1 - Fichier des données d'entrée	19
	6.2 - Polynôme estimé	21
	6.3 - Prévisions	21
	6.4 - Enregistrement des estimations	22
7	NOTATIONS UTILISEES	23
8	QUELQUES FORMULES DE CALCUL	24
	8.1 - OLS (Moindres carrés ordinaires)	24
	8.2 - WLS (Moindres carrés pondérés)	25
	8.3 - GLS_simples (Moindres carrés généralisés)	26
	8.4 - GLS_GGMR (Moindres carrés généralisés avec incertitude sur x)	26
	8.5 - Prévision y_0 (valeur moyenne)	27
	8.6 - Prévision x_0 (valeur moyenne)	28
9	BIBLIOGRAPHIE	28

1 INFORMATIONS GENERALES

- LNE-RegPoly est un programme exécutable développé sous le système d'exploitation Microsoft® Windows, avec la version R2020a de MATLAB®.
Pour utiliser LNE-RegPoly, il est nécessaire de télécharger et d'installer le composant MATLAB Compiler Runtime (MCR_R2020a (version 9.8) installer.exe disponible à l'adresse : <http://www.mathworks.fr/products/compiler/mcr/>
- LNE-RegPoly est accessible via le site web www.lne.fr/fr/logiciels/lne-regpoly. Le dossier à télécharger comporte plusieurs fichiers dont l'exécutable, des fichiers d'exemple au format Excel, ce manuel utilisateur et la licence.
- Licence : LNE-RegPoly est un **gratuitiel**. Il est distribué gratuitement avec une licence qui précise les conditions relatives à son utilisation. Le texte de la licence est disponible sur la page de téléchargement du logiciel.
- Support technique : l'adresse infomathstat@lne.fr est à votre disposition pour toute remarque concernant l'installation ou l'utilisation du logiciel.

2 FENETRE D'ACCUEIL

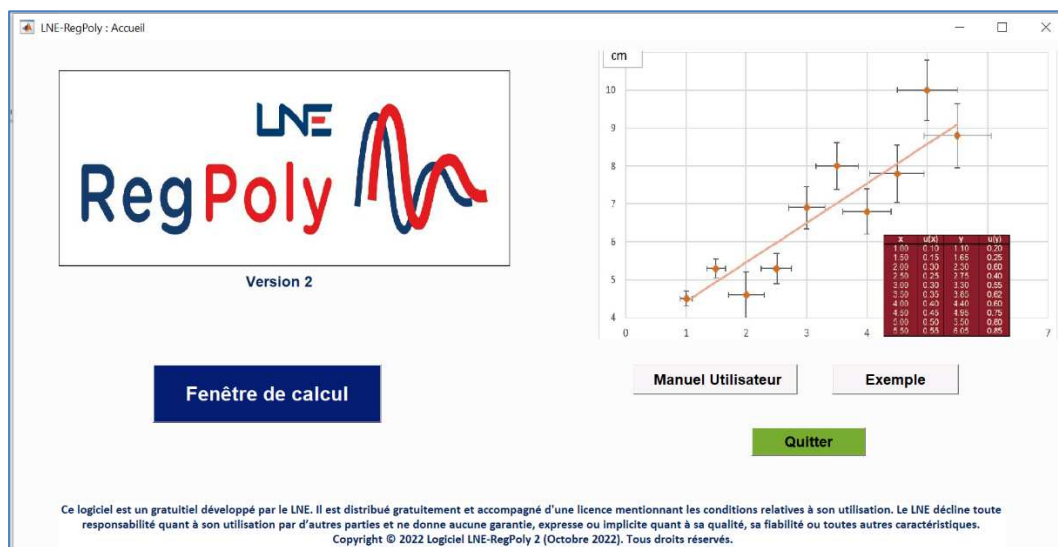


Figure 1 - Fenêtre d'accueil du logiciel

Cette fenêtre apparaît au démarrage du logiciel. Elle affiche la version et le copyright du logiciel. Elle comporte quatre boutons actifs que l'on actionne par pointer + clic gauche de la souris :

- **Manuel Utilisateur** : pour accéder à ce manuel
- **Exemple** : pour accéder à l'exemple du **paragraphe 6**
- **Fenêtre de calcul** : pour accéder à la fenêtre de calcul de LNE-RegPoly
- **Quitter** : pour sortir définitivement du logiciel

3 FENETRE DE CALCUL

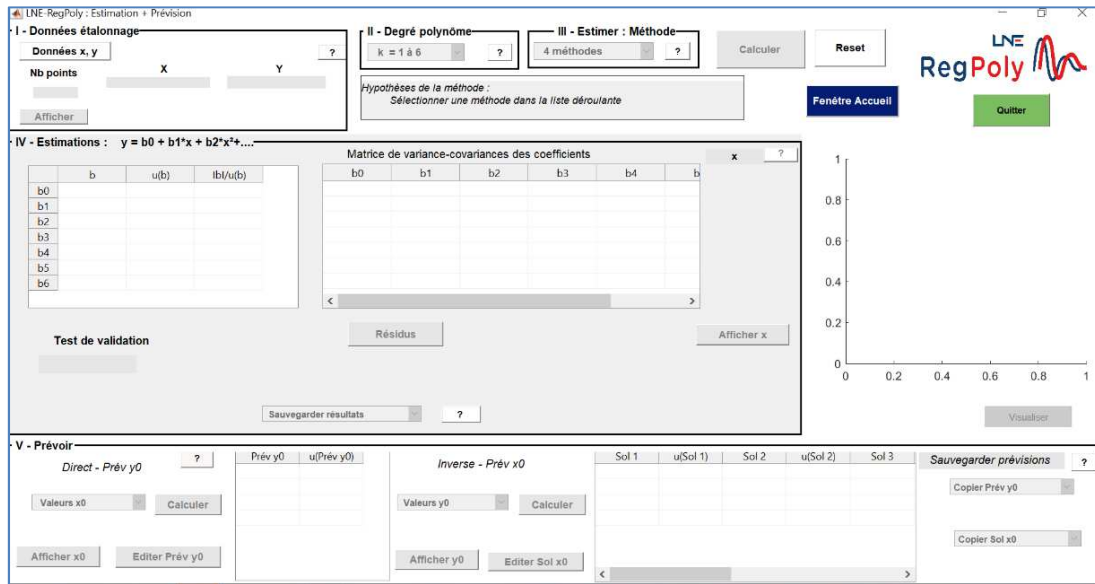


Figure 2 - Fenêtre de calcul du logiciel

Elle regroupe l'ensemble des opérations réalisées avec le logiciel : de la fourniture des données d'entrée à l'évaluation des prévisions, plus la sauvegarde des résultats.

La navigation dans cette fenêtre s'effectue en suivant 5 étapes matérialisées par les panneaux numérotés de I à V. L'utilisateur clique sur un bouton ou sélectionne une option dans "Menu déroulant". Lorsque l'élément (bouton ou menu) est actif, il est affiché en **blanc**, sinon il est en **gris**. Les noms de fichier sont inscrits sur un fond **vert**.

Les 5 panneaux sont décrits ci-dessous et les boutons généraux (Reset, Fenêtre Accueil, ..) au § 5.

3.1 - Données étalonnage (Panneau I)

La 1^{ère} étape consiste à indiquer à LNE-RegPoly les données d'entrée utilisées pour estimer le polynôme $y = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_kx^k$.

Ces données regroupent les n couples de points (valeur-étalon, indication), les incertitudes associées et le sens de modélisation.

LNE-RegPoly utilise deux types de variable :

- avec incertitude (« Variances » : les valeurs de la variable ont une incertitude type associée)
- sans incertitude (« Sans variance » : les valeurs de la variable ont une incertitude type nulle)

Le sens de modélisation est donné en indiquant la série de valeurs figurant en x ; par exemple, les valeurs-étalons dans le cas d'une fonction : indication = f(valeur-étalon). LNE-RegPoly affecte les valeurs dans les séries x et y et il génère automatiquement les termes x^k du polynôme de degré k. Ces termes sont supposés non corrélés.

3.1.1 - Structure du fichier de données et des feuilles Excel

Les données sont lues dans un fichier Excel, dans des feuilles et des cellules dédiées (cf. figures § 6.1 et les fichiers exemples fournis avec le logiciel).

- **Feuille "Etalon_Instrument"**

Cellules M1,M2 : nombre n de valeurs-étalons, d'indications.

Cellules B5,C5 et E5,F5 : nom de chaque variable, limité de préférence à 10 caractères. Pour assurer la traçabilité des données, il est conseillé de remplir ces champs (exemples de noms génériques : "Etalon", "Instrument" ou "Grandeur 1", "Grandeur 2")

Cellules B6:C(6 + n -1) : couples (valeur-étalon,indication) sur 2 colonnes et n lignes. Les séries sont de préférence ordonnées dans l'ordre croissant des valeurs figurant les x_i .

Cellules E6:F(6 + n -1) : incertitudes types associées aux valeurs-étalons et aux indications sur 2 colonnes et n lignes.

Les incertitudes des indications de l'instrument sont obligatoirement positives. Celles associées aux valeurs-étalons sont positives ou nulles. Lorsqu'elles sont nulles, la colonne E comporte des "0".

Cellule K5 : sens de modélisation indiqué comme

- "Etalon" : les valeurs-étalons forment la série x
- "Instrument" : les indications forment la série x

Les valeurs de l'autre variable forment la série y. **Le sens ne peut pas être modifié dans la fenêtre de calcul.**

- **Feuille "VCOV_Etalon" (facultative)**

Elle contient la matrice de variances-covariances des valeurs-étalons lorsque celles-ci sont corrélées. Cette matrice comprend n variances dans la diagonale principale et $(n^2 - n)$ covariances disposées de manière symétrique de part et d'autre de cette diagonale.

Commençant en cellule B6, elle occupe une plage de $(n \times n)$ cellules. Par exemple, la matrice correspondant à $n = 10$ points est dans la plage B6:K15.

Il est possible de rentrer simplement la partie triangulaire inférieure de la matrice.

- **Feuille "VCOV_Instrument" (facultative)**

Matrice de variances-covariances des indications de l'instrument lorsque celles-ci sont corrélées. La structure est identique à celle de la feuille "VCOV_Etalon".

- **Bouton d'aide**

Des éléments du fichier de données sont rappelés en cliquant sur le bouton  du panneau :

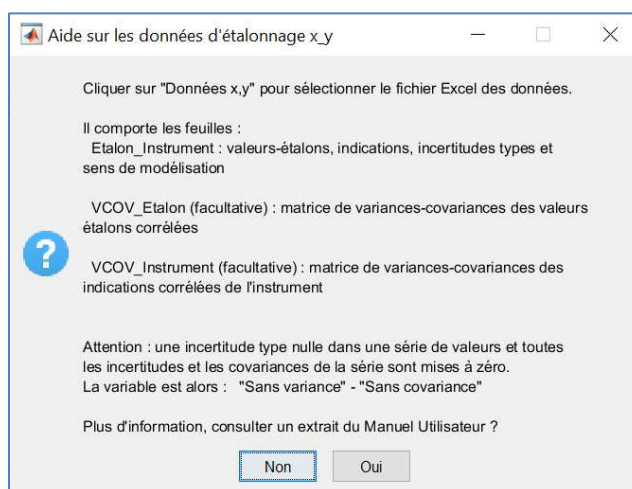


Figure 3 - Ecran d'aide sur le fichier des données x,y

3.1.2 - Validation des données

- **Fichier** : le logiciel teste la conformité du fichier
 - en vérifiant la présence de la feuille "Etalon_Instrument"
 - le cas échéant, il lit les feuilles "VCOV_Etalon" et "VCOV_Instrument" et reconstitue les matrices de variances-covariances
 - l'ordre des feuilles dans le fichier est libre (avec la possibilité d'ajouter d'autres feuilles – voir le paragraphe consacré aux sauvegardes)
 - le nom du fichier est limité de préférence à 15 caractères
- **Incertitudes des données** : le logiciel considère comme :
 - nulle, toute incertitude type négative ou incorrecte
 - **sans incertitude, une variable dont au moins une des incertitudes types est nulle**
 - **sans matrice de variances-covariances, une variable qui a des incertitudes types nulles**
 - nulle, une matrice de variances-covariances qui n'est pas inversible et définie positive
 - non corrélées entre elles, les valeurs-étalons et les indications.

En cas d'anomalie, LNE-RegPoly ne charge pas les données.



Le cas des répétitions de y associées à la même valeur de x est possible lorsque x est sans incertitude.

3.1.3 - Actions

Cliquer sur le bouton **Données x,y** puis indiquer l'emplacement et le nom du fichier dans la fenêtre correspondante (cf. figure 4). Le répertoire proposé est celui dans lequel est enregistré le logiciel (au lancement de LNE-RegPoly, ensuite il s'agit du dernier répertoire consulté).

Le fichier Excel peut avoir l'extension « xls » ou «xlsx » (de préférence).

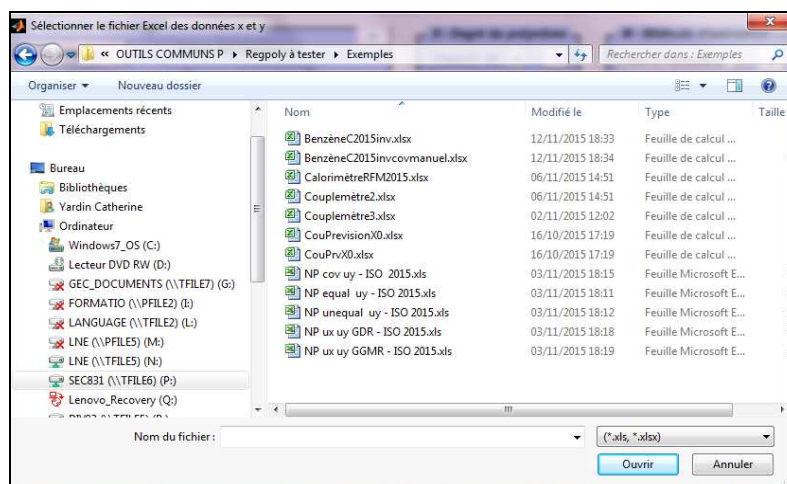


Figure 4 - Fenêtre de sélection du fichier Excel

A l'issue de la lecture et de la vérification des données, LNE-RegPoly :

- affecte les valeurs-étalons et les indications dans les séries x et y,
- complète le panneau I : nom, structure d'incertitude des variables, nombre de couples (x_i, y_i) ("Nb points"),
- représente graphiquement les points (x_i, y_i) avec les intervalles d'incertitude.

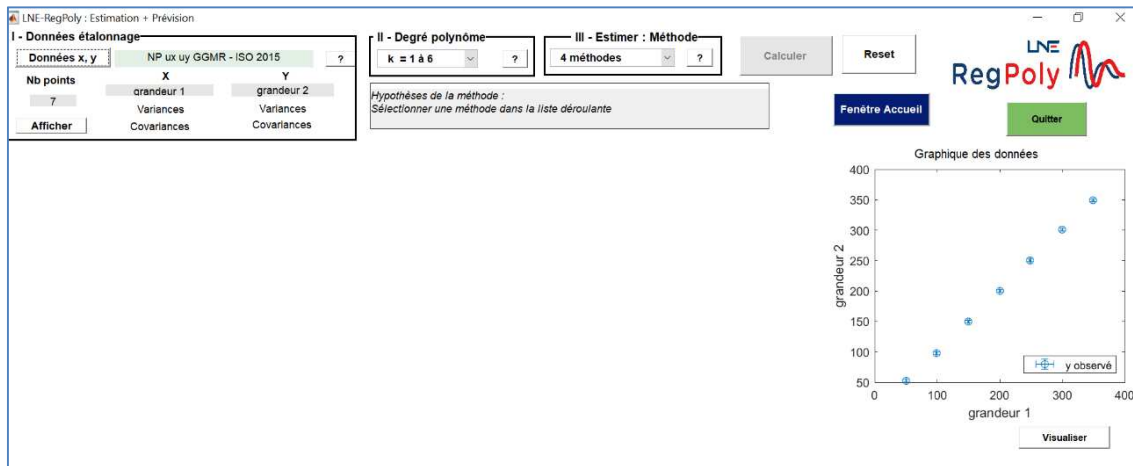


Figure 5 - Fenêtre de calcul après le chargement des données d'entrée

Cliquer sur le bouton **Afficher** rendu actif (couleur blanche) pour visualiser les valeurs et les incertitudes des données d'entrée. Les figures suivantes se superposent à la fenêtre de calcul.

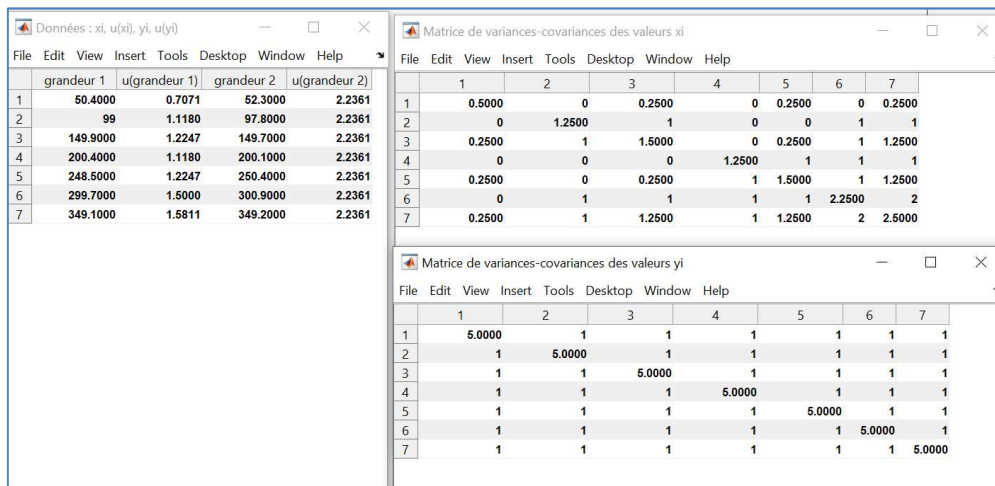


Figure 6 - Affichage des données d'entrée (tableau des valeurs et matrices de variances-covariances)

3.2 - Degré du polynôme (Panneau II)

La 2^e étape consiste à choisir le degré k du polynôme. LNE-RegPoly estime un polynôme avec le terme constant b_0 :

$$y = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \dots + b_k x^k = f(x)$$

Le degré k du polynôme se situe dans l'ensemble $\{1, 2, \dots, 6\}$; à l'exception des cas où le nombre n de points limite la valeur de k à $(n-2 < 6)$.

. Restriction sur le degré : 1 point est nécessaire pour estimer le terme constant b_0 et au moins 1 point supplémentaire est requis pour calculer les écarts entre les points et le polynôme. Il reste donc $(n-2)$ points pour estimer les k coefficients (b_1, \dots, b_k) du polynôme.

ex : un polynôme de degré $k = 2$ requiert au minimum $n = 4$ points, pour estimer 3 coefficients (b_0, b_1, b_2) et calculer les résidus.

Le polynôme est d'autant mieux estimé que le nombre n est élevé ; il est recommandé de limiter, quand cela est possible, le degré k du polynôme.

L'aide  du panneau affiche ces restrictions sur la valeur de k (cf. figure 7).

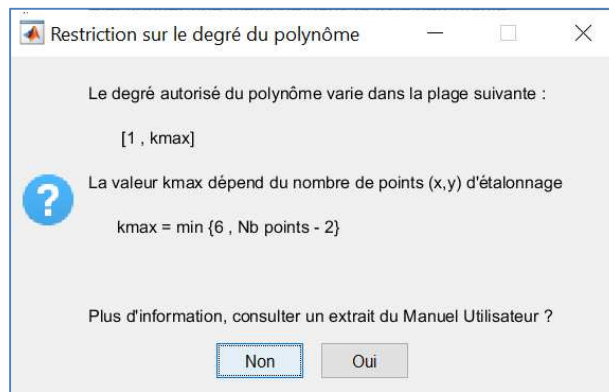


Figure 7 - Restriction sur le degré du polynôme

. **Action** : sélectionner un nombre dans le menu déroulant du panneau. Si ce degré n'est pas adapté aux données, un message erreur s'affiche et votre choix n'est pas validé.

3.3 - Méthode d'estimation (Panneau III)

3.3.1 - Caractéristiques des méthodes programmées dans le logiciel

La 3^e étape porte sur le choix d'une méthode d'estimation. Pour tenir compte de la variation des incertitudes dans le domaine d'étalonnage et des corrélations, LNE-RegPoly propose trois méthodes type moindres carrés pondérés. Suivant un ordre croissant de complexité, il s'agit des WLS, des GLS_simples et des GLS_GGMR (cf. § 9 (1)).

La méthode des OLS, plus simple mais moins adaptée aux données de l'étalonnage, est également proposée.

Les caractéristiques des méthodes sont rappelées figure 8 et au paragraphe 8.

3.3.2 - Actions

- Sélectionner une méthode dans la liste déroulante du panneau. Les « Hypothèses de la méthode » s'affichent dans le cadre situé sous le panneau.
- Lorsque le degré du polynôme et la méthode sont correctement renseignés, le bouton **Calculer** devient actif (fond blanc).
- Cliquer sur le bouton **Calculer** pour lancer les calculs. Les résultats s'affichent dans le panneau "IV – Estimations".



Il est possible de modifier la méthode sélectionnée ou le degré du polynôme. Cela ne change pas les résultats tant que vous n'avez pas cliqué sur le bouton **Calculer**.

3.3.3 - Incompatibilité entre la méthode sélectionnée et l'incertitude des données

LNE-RegPoly vérifie que les incertitudes associées aux données correspondent aux hypothèses de la méthode sélectionnée.

Dans les cas suivants, les calculs ne sont pas réalisés et un message erreur est affiché :

- WLS : lorsque la variable figurant en Y est « Sans variance ».
- GLS_simples : lorsque la variable figurant en Y est « Sans covariance ».
- GLS_GGMR : lorsque la variable figurant en X est « Sans variance ».

En revanche, la méthode des OLS est toujours faisable.

Thèmes	OLS	WLS	GLS_simples	GLS_GGMR
Hypothèses				
valeurs x	sans incertitude			incertitude variable, connue corrélation
valeurs y	incertitude			
	constante, inconnue sans corrélation	variable, connue sans corrélation	variable, connue corrélation	variable, connue corrélation
écarts considérés	entre les valeurs y et le polynôme			entre les valeurs x, y et le polynôme
Incertitude à fournir en entrée	Aucune	$u(y_i)$	$u(y_i)$ Matrice U_y	$u(y_i), u(x_i)$ (Matrices U_y, U_x)
Paramètres estimés				
coefficients incertitudes types covariances	b_0, b_1, \dots, b_k $u(b_0), u(b_1), \dots, u(b_k)$ $u(b_0, b_1), \dots, u(b_0, b_k)$			Matrice U_b
incertitude type des valeurs y : $u(y)$	S_{y_OLS}	-----		
valeurs des x	-----			x et $u(x)$
Validation				
nb degrés de liberté (ddl)	$n - k + 1$			
test global	Test F de Fisher Coefficient R^2	Test du Khi2 d'adéquation des données au modèle Ratio de Birge		
résidus	Résidus Résidus normalisés	Résidus Résidus pondérés		
test coefficient $\neq 0$	Test t de Student	Test de conformité de la moyenne d'une variable normale		

Figure 8 - Caractéristiques des méthodes d'estimation

3.4 - Estimations des coefficients du polynôme (panneau IV)

La 4^e étape consiste à analyser et valider le polynôme estimé.

3.4.1 - Résultats de l'estimation

A l'issue du calcul, LNE-RegPoly :

- . affiche les paramètres estimés et le résultat du test de validation globale avec la conclusion associée,
- . met à jour le graphique des données avec le polynôme estimé et son intervalle d'incertitude (cf. § 8.5). La méthode utilisée est indiquée au-dessus du graphique. Cliquer sur **Visualiser** pour augmenter la fenêtre graphique.

Certains résultats dépendent de la méthode :

- . écart type S_{y_OLS} , statistique de Fisher et coefficient de détermination (OLS),
- . ratio de Birge et statistique du Khi2 (autres méthodes),
- . estimation des valeurs de x (GLS_GGMR). Cliquer sur **Afficher x** pour visualiser « x Estimées » et $u(x)$ (« x Estimées »).

La figure 9 présente un exemple de résultats obtenus avec la méthode GLS_GGMR.

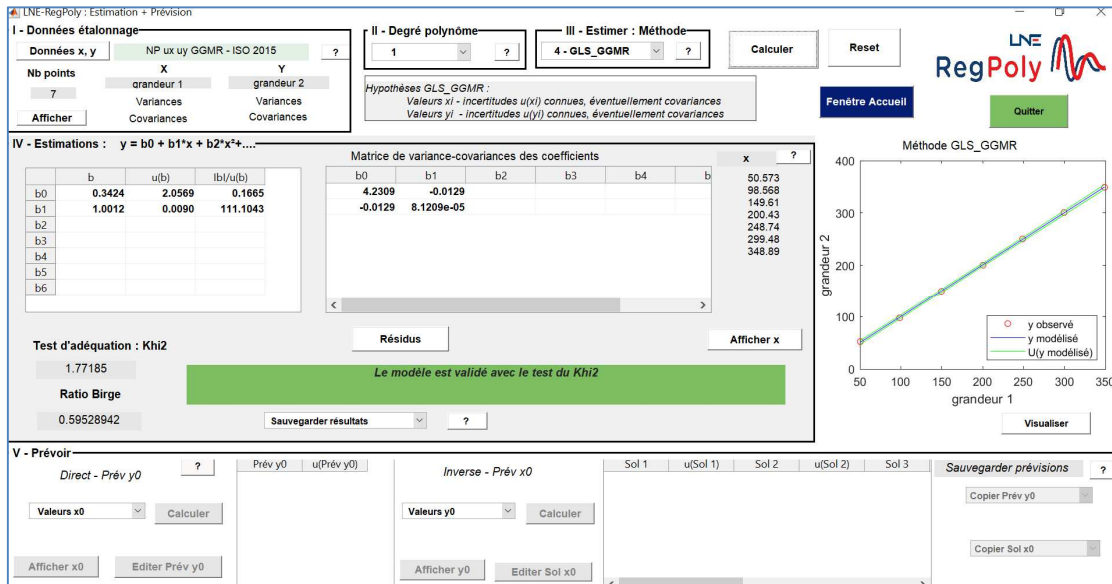


Figure 9 - Résultats de l'estimation GLS_GGMR

3.4.2 - Résidus et analyse des résultats

LNE-RegPoly calcule les résidus du modèle et les résidus normalisés (méthode OLS) ou pondérés (autres méthodes).

Cliquer sur le bouton **Résidus** devenu actif pour afficher (cf. figure 10) :

- . le graphe des résidus normalisés/pondérés en fonction de x,
- . le tableau des résidus simples et normalisés/pondérés.

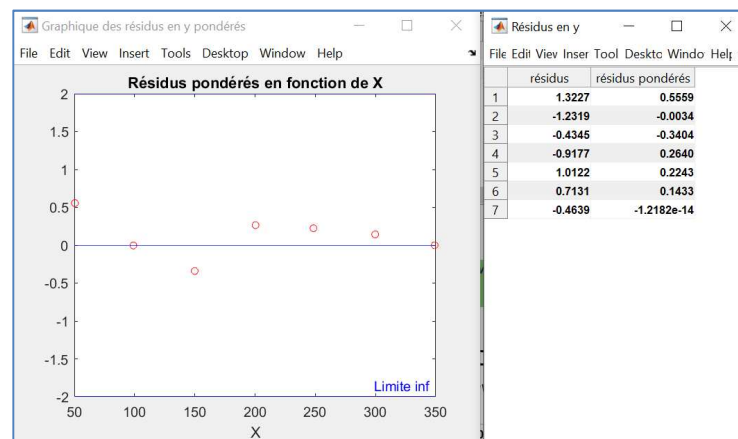


Figure 10 - Résidus et graphe des résidus pondérés

L'examen des résultats des tests de validation globale et partielle, du graphe des résidus permet d'accepter ou de rejeter le modèle. Le bouton d'aide **?** (situé en haut, à droite du panneau) affiche quelques éléments utiles pour réaliser cette analyse.

Tant que le polynôme estimé n'est pas validé, il est inutile de passer à l'étape suivante.

3.5 - Prévisions (Panneau V)

3.5.1 - Généralités

La 5^e étape consiste à utiliser le polynôme pour évaluer de nouvelles valeurs des variables :

- cas y : Prév $y_0 = f(x_0)$ et son incertitude $u(\text{Prév } y_0)$
- cas x : Prév $x_0 = f^{-1}(y_0)$ et son incertitude $u(\text{Prév } x_0)$

Les deux cas sont gérés séparément dans une rubrique dédiée : «Direct - Prév y_0 » et «Inverse - Prév x_0 »(cf. figure 2).

Les valeurs connues x_0 ou y_0 en entrée du calcul sont appelées des prédicteurs et les valeurs calculées Prév x_0 ou Prév y_0 des prévisions :

- prédicteurs (x_0 ou y_0) : il peut s'agir des données initiales (x_i, y_i) ou d'autres valeurs (cf. § 3.5.2).
- prévisions (Prév x_0 ou Prév y_0) : le calcul est effectué de manière directe dans le cas Prév y_0 . Dans le cas Prév x_0 , le polynôme est inversé en y_0 avec la possibilité d'obtenir plusieurs solutions (cf. § 3.5.3).

Extrapolation : l'extrapolation de la fonction d'étalonnage en dehors du domaine défini par les valeurs (x_i, y_i) (avec leurs incertitudes) est déconseillée. Elle est néanmoins autorisée dans LNE-RegPoly parce que :

- ce domaine peut légèrement différer des limites théorique visées,
- les valeurs extrêmes du polynôme estimé se situent généralement hors de ce domaine (hormis le cas de la droite).

LNE-RegPoly utilise les règles d'extrapolation suivantes :

	Prédicteur	Prévision
Cas variable x	$x_{i,\min} - 4 u(x_{i,\min})$ $x_{i,\max} + 4 u(x_{i,\max})$	$x_{i,\min} - 20\%$ $x_{i,\max} + 20\%$
Cas variable y	$y_{i,\min} - 4 u(y_{i,\min})$ $y_{i,\max} + 4 u(y_{i,\max})$	$y_{i,\min} - 30\%$ $y_{i,\max} + 30\%$
Valeurs hors limites	LNE-RegPoly ne fait pas le calcul	message avertissant l'utilisateur

Figure 11 - Valeurs limites en cas d'extrapolation

Note : Le coefficient 4 utilisé pour les prédicteurs correspond à environ 2 fois l'incertitude élargie U. Lorsque la variable est sans incertitude, la règle est : -20% en deçà du min et +10% au-delà du max.



Le calcul de prévision est toujours précédé de l'étape estimation afin de charger en mémoire les coefficients du polynôme.

3.5.2 - Prédicteurs x_0 et y_0

Trois options sont proposées pour le choix des prédicteurs :

Données initiales : choisir "Données x" ("Données y") pour reprendre les valeurs x_i (y_i). **Toutefois, leurs incertitudes types ne sont pas utilisées dans le calcul.**

Nouvelles valeurs : elles sont lues dans une feuille Excel nommée "Prévision" présente dans le "Fichier des données x,y" ou un "Autre fichier".

La structure de la feuille est la suivante (cf. § 6.3) :

- . cellule M1 : nb valeurs-étalons et/ou cellule M2 : nb indications
- . plage de cellules B6:B et C6:C : valeurs-étalons avec leurs incertitudes types
- . plage de cellules E6:E et F6:F : indications avec leurs incertitudes types
- . cellule K5 : rappel du sens de modélisation ("Etalon" ou "Instrument")

remarques :

- il est possible de renseigner une seule série de valeurs (étalon ou indication)
- le sens de modélisation détermine la série chargée comme prédicteurs par le logiciel
- une incertitude nulle est obligatoirement codée "0". **Une même série peut comporter des valeurs avec et sans incertitude.**

- le nombre maximal de prédicteurs est limité au nombre de lignes d'une feuille Excel.

. Actions : sélectionner la provenance des données dans le menu déroulant. Dans le cas "Autre fichier", le logiciel ouvre une fenêtre de sélection d'un fichier Excel.

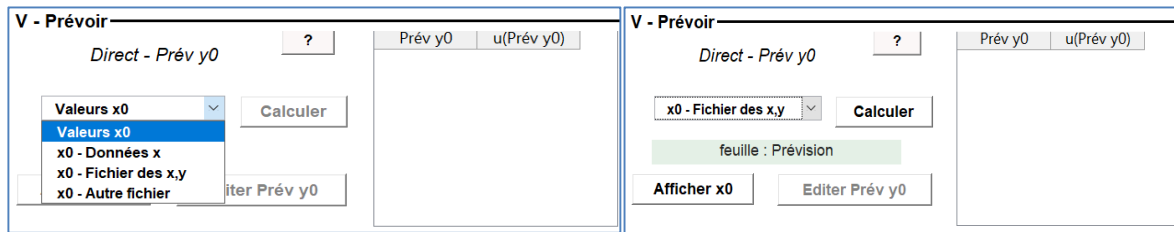


Figure 12 - Panneau Prévisions avant (1) et après (2) le choix de la feuille « Prévission »

Lorsque les valeurs sont valides, LNE-RegPoly affiche la provenance des données : "Données x" ou "feuille : Prévission" (du fichier des données x,y) ou nom du fichier des prédicteurs (cas Autre fichier). Les boutons **Afficher..** et **Calculer** deviennent actifs (couleur blanche).

Un clic sur **Afficher x0** par exemple, ouvre la fenêtre suivante :

	grandeur 1- x	u(x)		grandeur 1- x0	u(x0)
1	50.4000	0.7071	1	50	0
2	99	1.1180	2	70	0
3	149.9000	1.2247	3	90	0
4	200.4000	1.1180	4	150	0
5	248.5000	1.2247	5	250	0
6	299.7000	1.5000	6	355	0
7	349.1000	1.5811			

Figure 13 - Prédicteurs x_0 et leurs incertitudes types (avec rappel des données x_i)

Pour faciliter le contrôle par l'utilisateur, le logiciel affiche simultanément les données initiales et les prédicteurs.

. Vérification des données de la feuille "Prévission" : LNE- RegPoly contrôle

- la présence de la feuille "Prévission" et des valeurs des prédicteurs dans le fichier indiqué
- les contraintes sur les prédicteurs évoquées ci-dessus
- la cohérence entre le sens de modélisation indiqué ici et celui utilisé lors de l'estimation

En cas de non-conformité, un message erreur indique la première condition non vérifiée et le bouton **Calculer..** n'est pas actif (couleur grise) ; idem pour le bouton **Afficher..** sauf dans le cas de la non-conformité b) où il est possible de visualiser les valeurs incorrectes des prédicteurs.

3.5.3 - Calcul des prévisions avec leurs incertitudes

3.5.3.1 - Prévisions Prév y_0

. Expressions : Prév y_0 est obtenue en évaluant le polynôme f au point x_0 . Son incertitude type correspond à la somme quadratique des incertitudes issues des coefficients du polynôme (u_i) et du prédicteur $u(x_0)$. Ces composantes sont supposées non corrélées (cf. § 8.5).

$$\text{Prév } y_0 = f(x_0) \quad \text{et} \quad u(\text{Prév } y_0) = \sqrt{u_i^2(\text{Prév } y_0) + u_{x_0}^2(\text{Prév } y_0)}$$

. remarques sur $u(\text{Prév } y_0)$:

- l'incertitude du prédicteur $u(x_0)$ peut être nulle,
- pour propager l'incertitude des données initiales x_i , recopier les dans la feuille Prévion,
- **il n'est pas possible d'ajouter directement dans le logiciel, d'autres composantes comme par exemple, celle issue des résidus du modèle ou de la prévision individuelle.**

. Actions : cliquer sur le bouton **Calculer** pour lancer le calcul. En retour, LNE-RegPoly affiche les valeurs Prév y_0 et leur incertitude type $u(\text{Prév } y_0)$ dans le tableau dédié (cf. figure 14). Pour afficher distinctement les résultats, cliquer sur le bouton **Editer Prév y_0** rendu actif.

The screenshot shows two windows. The left window, titled 'V - Prévoir', contains a dropdown menu for 'x0 - Fichier des x,y', a 'Calculer' button, a 'feuille : Prévion' indicator, and 'Afficher x0' and 'Editer Prév y0' buttons. The right window, titled 'Prédicteurs x0 et Prévisions y0', displays a table with the following data:

	Prév y_0	$u(\text{Prév } y_0)$
	50.4039	1.7736
	70.4286	1.6808
	90.4532	1.6030
	150.5270	1.4809
	250.6501	1.6926
	355.7793	2.3061

The right window also features a menu bar (File, Edit, View, Insert, Tools, Desktop, Window, Help) and a table with columns 'grandeur 1- ...', 'u(x0)', 'grandeur 2- ...', and 'u(Prév y0)'. The data in this table is as follows:

	grandeur 1- ...	u(x0)	grandeur 2- ...	u(Prév y0)
1	50	0	50.4039	1.7736
2	70	0	70.4286	1.6808
3	90	0	90.4532	1.6030
4	150	0	150.5270	1.4809
5	250	0	250.6501	1.6926
6	355	0	355.7793	2.3061

Figure 14 - Prévisions Prév y_0 - tableau dédié et fenêtre d'affichage

3.5.3.2 - Prévisions Prév x_0

Dans ce cas, le polynôme est inversé à la valeur y_0 considérée. Pour f de degré 1, il existe une seule solution Prév x_0 dont l'expression analytique est connue (cf. § 8.6). Pour les polynômes de degré k supérieur à 1, l'inversion donne généralement k solutions, dont certaines peuvent être des nombres complexes. En métrologie, sauf cas particulier, une seule de ces solutions correspond à la valeur cherchée Prév x_0 .

LNE-RegPoly évalue les k solutions avec une méthode d'analyse numérique (utilisation du solveur de Matlab) et laisse à l'utilisateur le soin d'identifier parmi les solutions réelles la solution Prév x_0 .

. Valeur : Prév $x_0 = f^{-1}(y_0)$ où f est le polynôme estimé

Il s'agit d'une évaluation inverse (appelée « calibration » dans certains ouvrages).

Lorsque le degré k est supérieur à 1, le logiciel affiche en ligne pour chaque prédicteur :

- **d'abord les solutions réelles dans l'ordre décroissant**
- puis les solutions complexes remplacées par le terme « complexe »

. Incetitude type des solutions réelles : elle est obtenue en propageant les incertitudes associées aux coefficients et à la valeur y_0 . A l'exception du degré 1, le calcul est réalisé avec une formule approchée. Le logiciel n'effectue pas le calcul pour les solutions complexes et affiche à la place le code " - " (cf. figure 15).

. Actions : cliquer sur le bouton **Calculer** pour lancer le calcul. En retour, le logiciel affiche en ligne l'ensemble des solutions x_0 correspondant à chacune des valeurs y_0 dans le tableau dédié.

Pour afficher plus clairement toutes ces solutions x_0 , cliquer sur le bouton **Editer sol x_0**

	y0	u(y0)
1	1.0444	0
2	1.5569	0
3	2.0605	0
4	3.5363	0
5	4.9599	0

	Sol 1	u(Sol 1)	Sol 2	u(Sol 2)	Sol 3	u(Sol 3)
1	10.0198	0.0045	complexe	-	complexe	-
2	15.0277	0.0023	complexe	-	complexe	-
3	20.0156	0.0014	complexe	-	complexe	-
4	35.0174	0.0024	complexe	-	complexe	-
5	50.0599	0.0041	complexe	-	complexe	-

Information sur le tableau des solutions x0

Pour chaque prédicteur y0, les solutions x0 correspondantes sont affichées sur une ligne :

- 1) en commençant par les solutions réelles rangées dans l'ordre décroissant
Attention : des solutions peuvent sortir du domaine d'étalonnage
- 2) suivies des solutions complexes (codées par : 'complexe' et u = '-')

Une seule solution x0 est la prévision cherchée.

Figure 15 - Affichage des solutions de la prévision inverse avec un rappel sur le codage utilisé

4 ENREGISTRER LES ESTIMATIONS ET LES PREVISIONS DANS UN FICHER EXCEL

4.1 - Généralités

LNE-RegPoly sauvegarde à votre demande les résultats de l'estimation et les prévisions. Ils sont copiés dans des feuilles Excel dédiées : estimations du panneau IV (feuilles "OLS", "WLS", ...), prévisions (feuilles "Prév_x0", "Prév_y0").

L'opération est réalisée individuellement pour chaque calcul. Il est possible de réécrire dans une feuille, à la suite des sauvegardes précédentes, même entre deux opérations de fermeture/ouverture du logiciel, grâce à l'utilisation d'un compteur.



Le fichier destinataire doit être fermé avant de déclencher l'opération d'écriture. LNE-RegPoly ne gère pas les problèmes qui pourraient survenir lors des échanges avec le logiciel Excel.

4.2 - Fichier de sauvegarde des résultats (de l'estimation)

4.2.1 - Sélection du fichier

Trois choix sont proposés via un menu déroulant (cf. figure 16) : écrire dans le fichier des données x,y (1), un fichier déjà existant (2) ou un nouveau fichier qui sera créé par LNE-RegPoly (3). Dans les cas (2) et (3), le logiciel ouvre une fenêtre de sélection d'un fichier Excel.

Après la sauvegarde, LNE-RegPoly affiche sur fond vert le nom du fichier dans lequel les résultats sont enregistrés.

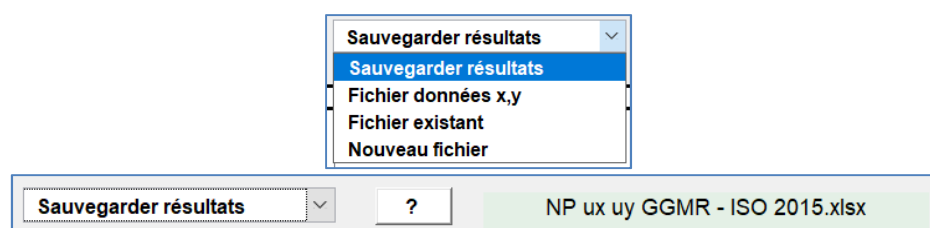


Figure 16 - Menu déroulant et inscription du nom du fichier de sauvegarde des résultats

4.2.2 - Structure du fichier

Il comporte les quatre feuilles associées aux méthodes («OLS», «WLS», «GLS-simples», «GLS_GGMR») dans lesquelles sont enregistrés la plupart des résultats affichés dans le panneau "IV - Estimations".

Deux exemples de feuille "OLS" et "GLS_GGMR" sont présentés dans les figures suivantes. Le logiciel écrit dans une plage de cellules spécifique qui varie avec la méthode. Un décalage en ligne est effectué à chaque nouvelle écriture.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
Estimation du polynôme par la méthode OLS												Compteur OLS	15	
date/heure	29-jul-22	13:54:53			Nom du fichier de données	NP ux uy GGMR - ISO 2015								
d° du polynôme			1		Matrice de variances-covariances									
	b	u(b)		b0	b1									
	b0	0.27065048	1.10299912		1.21660706	-0.0048781								
	b1	1.00107763	0.00494397		-0.0048781	2.4443E-05								
	s	1.30443327		R2	1.00E+00									
Validation	Fisher	40999.9509												
conclusion	Le modèle explique globalement les données (F > valeur seuil).													

Figure 17 - Feuille « OLS » après une sauvegarde

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
Estimation du polynôme par la méthode GLS_GGMR												Compteur GGMR	30	
date/heure	28-jul-22	21:03:38			Nom du fichier de données	NP ux uy GGMR - ISO 2015								
d° du polynôme			1		Matrice de variances-covariances									
	b	u(b)		b0	b1									
	b0	0.3424008	2.0569221		4.2309283	-0.0128832								
	b1	1.0012308	0.0090116		-0.0128832	8.121E-05								
x	50.57266	98.568171	149.60796	200.4286	248.73926	299.47591	348.89214	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	
u(x)	0.6774627	0.9679949	1.0886965	1.0623916	1.1828547	1.4534933	1.5553509	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	
Validation	Chi2	1.7718475												
	Ratio Birge	0.5952894												
conclusion	Le modèle est validé avec le test du Chi2													
date/heure	29-jul-22	13:47:37			Nom du fichier de données	NP ux uy GGMR - ISO 2015								
d° du polynôme			1		Matrice de variances-covariances									
	b	u(b)		b0	b1									
	b0	0.3424008	2.0569221		4.2309283	-0.0128832								
	b1	1.0012308	0.0090116		-0.0128832	8.121E-05								
x	50.57266	98.568171	149.60796	200.4286	248.73926	299.47591	348.89214	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	
u(x)	0.6774627	0.9679949	1.0886965	1.0623916	1.1828547	1.4534933	1.5553509	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	#N/A	
Validation	Chi2	1.7718475												
	Ratio Birge	0.5952894												
conclusion	Le modèle est validé avec le test du Chi2													

Figure 18 - Feuille "GLS_GGMR" après plusieurs sauvegardes

Outre les résultats, sont également indiqués : l'heure et la date du jour, le nom du fichier de données initiales et le compteur de gestion des réécritures en cellule "O1".

4.2.3 - Ecriture des résultats dans le fichier

. Etape 1 : création ou vérification du contenu du fichier indiqué

Dans le cas d'un nouveau fichier, le logiciel crée le fichier avec les 4 feuilles puis il le sauvegarde. Lorsque le fichier existe déjà, le logiciel commence par vérifier la présence de la feuille "OLS". Si c'est le cas, il considère que le fichier contient déjà les 4 feuilles dédiées et il ne le modifie pas. Autrement, il ajoute les 4 feuilles au début du fichier puis il le sauvegarde.



Veillez à utiliser un fichier complet, c'est-à-dire comportant les 4 feuilles "OLS", "WLS", "GLS_simples" et "GLS_GGMR".

. **Etape 2** : le logiciel sélectionne la feuille correspondant à la méthode utilisée et écrit les résultats dans les cellules dédiées. Le compteur est actualisé avec le numéro de la ligne où commencera la prochaine sauvegarde. Puis le fichier est enregistré.

4.3 - Fichier de sauvegarde des prévisions

4.3.1 - Structure du fichier et des feuilles "Prév_x0", "Prév_y0"

Les prévisions sont enregistrées dans la feuille "Prév_x0" dans le cas x et "Prév_y0" dans le cas y. **Contrairement aux résultats de l'estimation, les prévisions issues des différentes méthodes figurent dans la même feuille (pour faciliter les comparaisons).**

LNE-RegPoly copie les valeurs des prédicteurs, des prévisions et des incertitudes associées dans les emplacements dédiés à la méthode. La feuille « Prév_y0 » comporte 4 colonnes par méthode et la feuille « Prév_x0 », un plus grand nombre pour enregistrer les 6 solutions possibles associées à un prédicteur y0. Chaque méthode est gérée par un compteur individuel.

- **Feuille « Prév_y0 »**

Un exemple est présenté à la figure 19. Les pages d'écriture des différentes méthodes sont les suivantes :

- colonnes C à F : méthode OLS
- colonnes H à K : méthode WLS
- colonnes M à P : méthode GLS
- colonnes R à U : méthode GLS_GGMR
- cellule F3 : compteur OLS
- cellule K3 : compteur WLS
- cellule P3 : compteur GLS_simples
- cellule U3 : compteur GLS_GGMR

Figure 19 - Feuille de sauvegarde des prévisions y0

Pour assurer la traçabilité, LNE-RegPoly enregistre également :

- le nom de la méthode et le degré du polynôme
- la date et l'heure
- le nom du fichier de données x,y utilisé pour estimer le polynôme
- le nom du fichier de données x0 utilisé pour calculer les prévisions

- **Feuille « Prév_x0 »**

Un exemple est présenté à la figure 20. Pour chaque valeur y0, le nombre de prévisions Prév_x0 est au maximum de 6 (cf. degré maximal du polynôme). Les pages d'écriture sont les suivantes :

colonnes C à P : méthode OLS
 colonnes R à AE : méthode WLS
 colonnes AG à AT : méthode GLS_simples
 colonnes AV à BI : méthode GLS_GGMR

cellule F3 : compteur OLS
 cellule U3 : compteur WLS
 cellule AJ3 : compteur GLS_simples
 cellule AY3: compteur GLS_GGMR

The screenshot shows a complex Excel spreadsheet with multiple worksheets and data tables. The main content is organized into four quadrants, each representing a different method:

- Top-Left (Méthode OLS):** Counter 17. Table with columns: y0, uy0, Prévis_x0, u(Prév_x0). Data rows include values like 52.3, 97.8, 149.7, 200.1, 250.4, 300.9, 349.2.
- Top-Right (Méthode WLS):** Counter 43. Table with columns: y0, uy0, Prévis_x0, u(Prév_x0). Data rows include values like 52.3, 97.8, 149.7, 200.1, 250.4, 300.9, 349.2.
- Bottom-Left (Méthode GLS_simples):** Counter 43. Table with columns: y0, uy0, Prévis_x0, u(Prév_x0). Data rows include values like 52.3, 97.8, 149.7, 200.1, 250.4, 300.9, 349.2.
- Bottom-Right (Méthode GLS_GGMR):** Counter 17. Table with columns: y0, uy0, Prévis_x0, u(Prév_x0). Data rows include values like 52.3, 97.8, 149.7, 200.1, 250.4, 300.9, 349.2.

The spreadsheet also features a navigation bar at the bottom with tabs for 'Prév_x0', 'Prévision', 'OLS', 'WLS', 'GLS_simples', 'GLS_GGMR', 'Etalon_Instrument', and 'VCO ...'. The column headers at the top range from C to Y, and the row headers at the left range from y0 to BA.

Figure 20 - Feuille de sauvegarde des prévisions x0 (extrait)

Hormis les emplacements, la structure de la feuille est la même que celle de "Prév_y0".

- **Compteur de la méthode :** comme pour le fichier des résultats, le compteur indique la ligne de début d'écriture pour la prochaine sauvegarde.
- **Version 1 de LNE-RegPoly :** les emplacements utilisés ne correspondent pas à ceux décrits dans ce paragraphe. Il est nécessaire de générer une nouvelle feuille de sauvegarde.

4.3.2 - Sélection du fichier

Le processus est le même que pour la sauvegarde des résultats :

- 3 choix possibles : le fichier des données x,y , un fichier déjà existant ou un nouveau fichier.
- Après l'écriture des prévisions, affichage de l'item "feuille : Prév_x0" (ou "feuille : Prév_y0") dans le cas du fichier des données ou du nom du fichier de sauvegarde dans l'emplacement dédié.

L'opération est déclenchée via le menu déroulant : "Copier Sol x0" ou "Copier Prév y0".

4.3.3 - Ecriture des prévisions dans le fichier

Etape 1 : création des feuilles "Prév_x0" et "Prév_y0"

C'est le cas pour un nouveau fichier. Dans le cas d'un fichier déjà existant, le logiciel vérifie l'existence de la feuille dédiée (ex : "Prév_y0" dans le cas de la sauvegarde des prévisions Prév y₀) et en cas d'absence, il la crée. **Contrairement au cas des résultats, il ne crée pas l'autre feuille de prévision.**

Etape 2 : écriture des résultats dans la feuille dédiée et mise à jour du compteur indiquant la ligne où commencera la prochaine sauvegarde. Puis enregistrement du fichier actualisé.

Etape 3 : affichage du nom du fichier de sauvegarde à l'emplacement dédié :

- cas Fichier données x,y → "feuille : Prév_x0"
- autres cas → Nom du fichier inscrit sur fond vert

5 AUTRES ACTIONS

- **Bouton ?** : boutons d'aide généralement accessibles à tout moment (même sans données chargées dans le logiciel). Ils déclenchent l'affichage d'un message informatif sur le panneau concerné. Le message peut comporter un lien vous permettant d'accéder aux paragraphes de ce manuel (données x,y, méthodes, données x0y0, sauvegarde des résultats et des prévisions).
- **Bouton Reset** : rafraîchit l'écran de calcul, et met à zéro l'ensemble des données et des résultats stockés dans les variables du programme lors de la session.
- **Bouton Fenêtre Accueil** : permet de revenir à la fenêtre d'accueil, sans fermer la fenêtre de calcul.
- **Bouton Quitter** : déclenche la sortie définitive du logiciel sans sauvegarde des résultats.

6 EXEMPLE

Il s'agit du dosage d'une masse de benzène réalisé par les équipes du laboratoire du département Chimie. Les indications issues du chromatographe sont des aires de pic.

6.1 - Fichier des données d'entrée

Les données sont constituées de 26 couples (Masse, Aire). La fonction d'étalonnage est définie avec comme Masse = f(Aire), les masses_étalons sont en y et les aires de pic en x. Le sens de régression indiqué dans le fichier est donc "Instrument".

Les deux séries de données ont des incertitudes types variables. Les aires (x_i) ne sont pas corrélées, alors que les valeurs des masses sont fournies avec une matrice de variances-covariances. La matrice de 26 lignes et 26 colonnes, est symétrique et comprend les variances $u^2(y_i)$ sur sa diagonale principale et les covariances $u(y_i, y_j)$ de part et d'autre de cette diagonale.

Le fichier "BenzèneC2019invcovmanuel.xls" comporte 2 feuilles d'enregistrement des données x,y :

Titre : Etalonnage d'une cartouche de benzène														Etalon	nb points :	26	
														Instrument	nb points :	26	
Point	VALEUR			INCERTITUDE TYPE										Sens de la régression	X	Instrument	Indiquer la variable en X : "Etalon" - le logiciel met en X les valeurs de la colonne B "Instrument" - le logiciel met en X les valeurs de la colonne C
	grandeur	Etalon	Instrument	Etalon	Instrument									Le modèle estimé est : Y = f(X)			
6	1	300.26034	491628	5.48901105	2066.056656								Remarques : Etalon et Instrument sont des noms génériques. Ils sont utilisés pour déterminer le sens d'estimation et d'utilisation du modèle				
7	2	300.17739	486838	5.48751791	2045.926803								Si la variable Etalon ne comporte pas d'incertitude associée, il est nécessaire d'indiquer un zéro. La variable Instrument doit comporter des incertitudes.				
8	3	300.18776	491277	5.48770455	2064.583728												
9	4	300.10481	491483	5.48621142	2065.449986												
10	5	300.20850	491362	5.48807784	2064.941948												
11	6	399.38628	648633	7.27672835	2452.260324												
12	7	399.37591	653781	7.27654108	2471.72509												
13	8	399.39665	652774	7.27891562	2467.916831												
14	9	399.32406	653749	7.27560474	2471.602067												
15	10	399.3240649	649421.1	7.27560474	2455.240316												
16	11	500.5963474	811399.64	9.10627354	4544.413216												
17	12	501.6539672	818168.92	9.12540543	4582.325983												
18	13	500.5341345	824574.53	9.10514814	4618.20194												
19	14	500.5859786	813777.54	9.10608597	4557.731142												

Figure 21 - Feuille "Etalon_Instrument"

Matrice de variances-covariances des valeurs étalons														
Matrice symétrique : LNE-RegPoly n'utilise que la partie triangulaire inférieure de la matrice (cellules colorées en "orange foncé")														
point	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	30.1292423	29.51862552	29.5196295	29.5115976	29.5216375	39.1432015	39.1421941	39.1442088	39.1371573	39.1371573	48.98474736	49.0876622	48.9786936	48.983738
2	29.5186255	30.11285281	29.5115995	29.5035698	29.5136069	39.1325536	39.1315465	39.1335607	39.1265111	39.1265111	48.97142236	49.0743092	48.9653702	48.970413
3	29.5196295	29.51159946	30.1149012	29.5045732	29.5146107	39.1338846	39.1328774	39.1348917	39.1278419	39.1278419	48.97308796	49.0759783	48.9670356	48.972079
4	29.5115976	29.50356976	29.5045732	30.0985157	29.5065802	39.1232368	39.1222299	39.1242436	39.1171957	39.1171957	48.95976305	49.0626254	48.9537124	48.958754
5	29.5216375	29.51360693	29.5146107	29.5065802	30.1189984	39.1365466	39.1355394	39.1375538	39.1305034	39.1305034	48.97641926	49.0793166	48.9703665	48.975410
6	39.1432015	39.1325536	39.1338846	39.1232368	39.1365466	52.9507755	51.8904245	51.8930954	51.8837473	51.8837473	64.93860125	65.0750345	64.9305758	64.937263
7	39.1421941	39.13154651	39.1328774	39.1222299	39.1355394	51.8904245	52.9480501	51.8917599	51.882412	51.882412	64.93693003	65.0733597	64.9289048	64.9355921
8	39.1442088	39.1335607	39.1348917	39.1242436	39.1375538	51.8930954	51.8917599	52.9535009	51.8850825	51.8850825	64.94027248	65.0767092	64.9322468	64.938934
9	39.1371573	39.12651109	39.1278419	39.1171957	39.1305034	51.8837473	51.882412	51.8850825	52.9344243	51.8757358	64.92857399	65.0649861	64.9205498	64.9272361
10	39.1371573	39.12651109	39.1278419	39.1171957	39.1305034	51.8837473	51.882412	51.8850825	51.8757358	52.9344243	64.92857399	65.0649861	64.9205498	64.9272361
11	48.9847474	48.97142236	48.973088	48.9597631	48.9764193	64.9386013	64.93693	64.9402725	64.928574	64.928574	82.92421779	81.4364692	81.2556902	81.2640591
12	49.0876622	49.07430922	49.0759783	49.0626254	49.0793166	65.0750345	65.0733597	65.0767092	65.0649861	65.0649861	81.43646925	83.2730243	81.4264049	81.4347911
13	48.9786936	48.96537022	48.9670356	48.9537124	48.9703665	64.9305758	64.9289048	64.9322468	64.9205498	64.9205498	81.25569019	81.4264049	82.9037227	81.2540161
14	48.9837384	48.97041365	48.9720792	48.9587546	48.9754104	64.9372637	64.9355925	64.9389348	64.9272366	64.9272366	81.26405953	81.4347918	81.2540165	82.928081
15	48.9756667	48.96344415	48.9640094	48.950687	48.9573401	64.9365631	64.9348933	64.939324	64.9165277	64.9165277	81.2506688	81.4317377	81.2406373	81.248891

Figure 22 - Feuille "VCOV_Etalon"

Après lecture, LNE-RegPoly affiche le nom du fichier, indique qu'il y a 26 points, des incertitudes sur x et des covariances sur y (cf. figure 24, panneau 1).

Il est possible de visualiser le graphique des données avec leurs intervalles d'incertitudes.

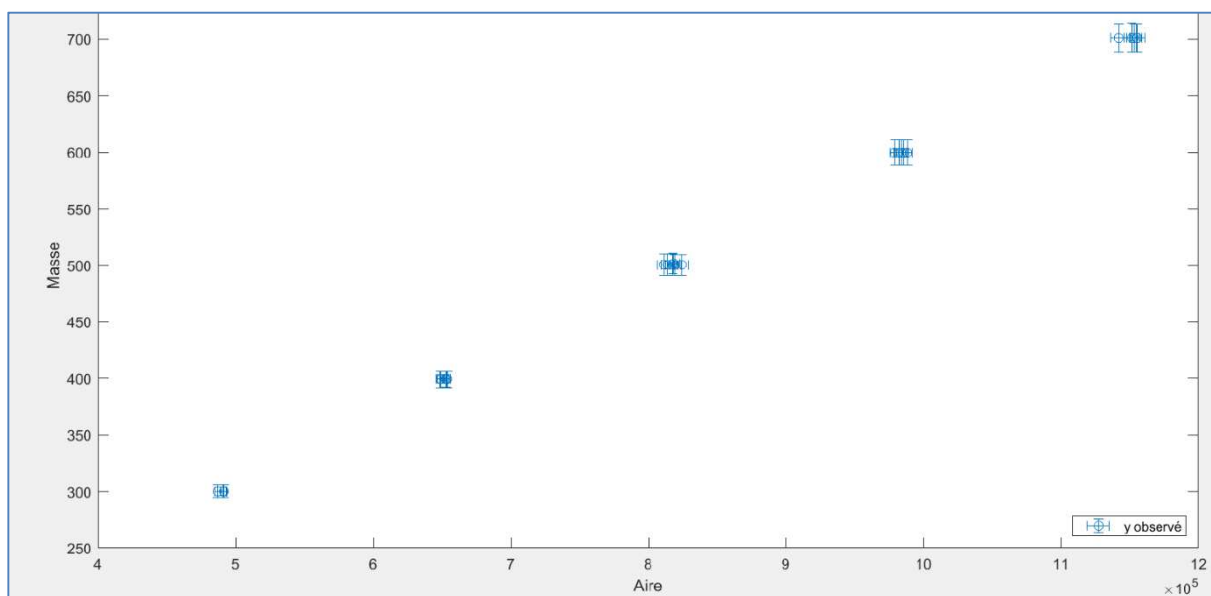


Figure 23 - Graphique des données redimensionné à l'aide du bouton **visualiser**

6.2 - Polynôme estimé

Le modèle est une droite ($k = 1$) estimée par la méthode GLS_GGMR.

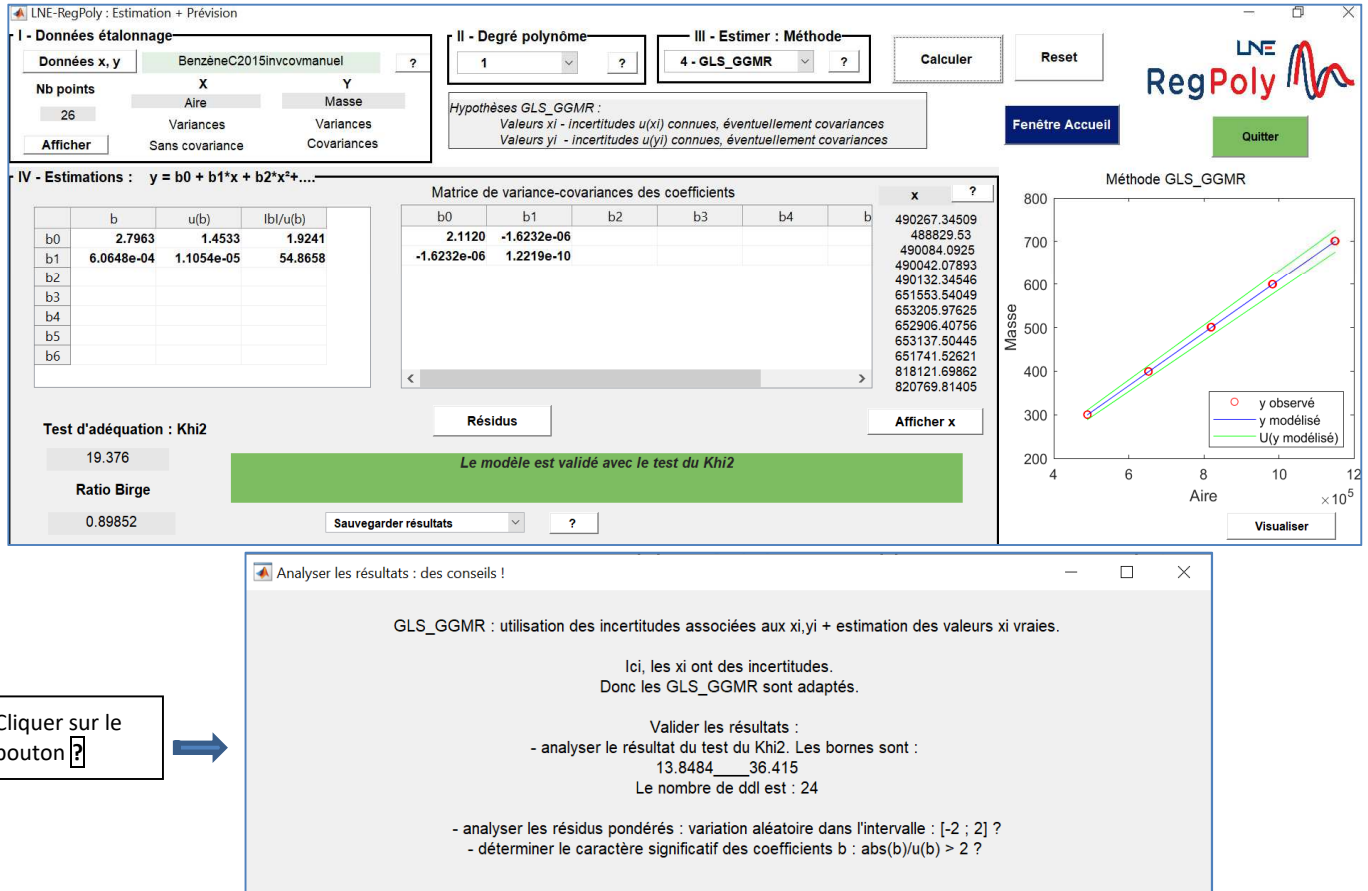


Figure 24 - Résultats de l'estimation (haut) et Ecran d'aide à l'analyse (bas)

Le polynôme de degré 1 est validé globalement selon le test du Khi2 et les coefficients b_0 et b_1 sont significatifs.

6.3 - Prévisions

On souhaite évaluer la masse correspondant à différentes valeurs d'aire de pic. Ces valeurs figurent dans les colonnes E:F de la feuille "Prévision" représentée ci-dessous. Elles sont sans incertitude.

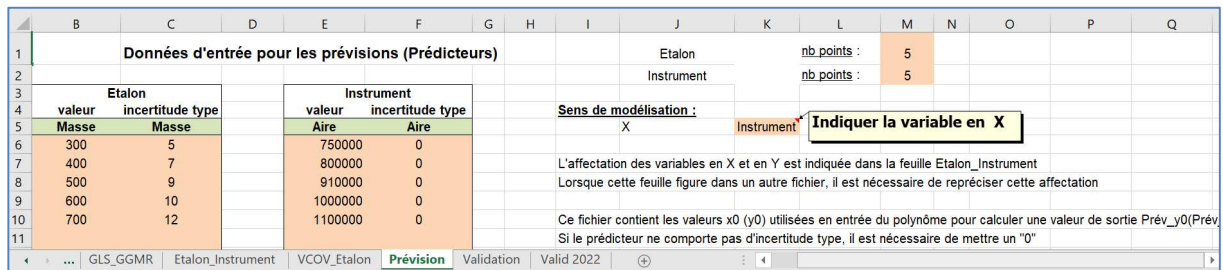


Figure 25 - Feuille "Prévision"

D'après le sens d'estimation de f, ces valeurs sont des prédicteurs x_0 à renseigner dans la partie « Direct – Prév y_0 » du panneau V. Après le calcul, LNE-RegPoly affiche les valeurs prévues des masses et leurs incertitudes associées.

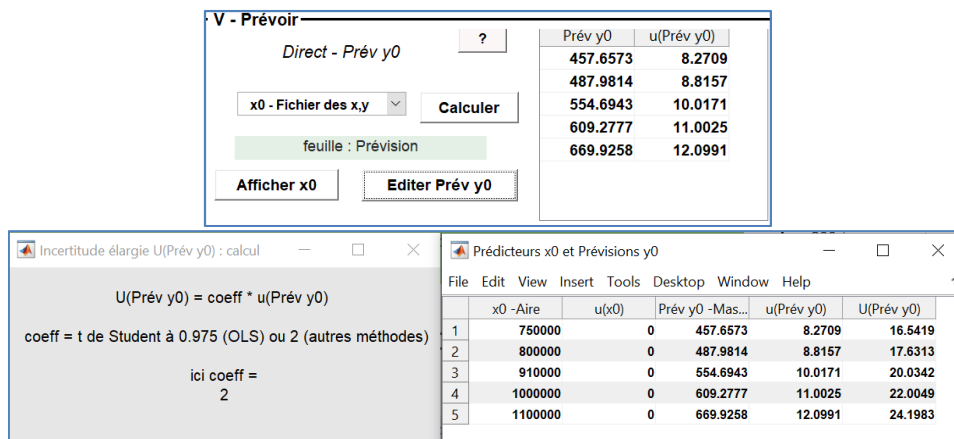


Figure 26 - Valeurs prévues des masses y_0 : Panneau (haut) et Edition Prév y_0 (bas)

6.4 - Enregistrement des estimations

Les estimations et les prévisions sont sauvegardées dans le fichier des données initiales. Le logiciel crée les 4 feuilles « méthode » (« OLS », « WLS », « GLS » et « GLS_GGMR ») et la feuille « Prev_y0 ». Puis il remplit les feuilles « GLS_GGMR » et « Prev_y0 », seules destinataires des sauvegardes. Elles sont représentées dans les figures ci-dessous.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1		Estimation du polynôme par la méthode GLS_GGMR												Compteur GGMR	17
2															
3	date/heure	21-oct-19	11:15:04												
4	d° du polynôme			1											
5				u(b)											
6	b0	2.79625232	1.45328192		2.1120283	-1.62E-06									
7	b1	0.00060648	1.1054E-05		-1.6232E-06	1.2219E-10									
8															
9	x	490267.345	488829.53	490084.092	490042.079	490132.345	651553.54	653205.976	652906.408	653137.504	651741.526	818121.699	820769.814	820374.615	
10	u(x)	1284.40727	1281.0741	1284.12683	1284.23333	1284.19644	1474.80657	1478.72834	1477.97845	1478.60634	1475.27624	2044.50816	2052.15253	2051.99702	
11	Validation														
12	Khi2	19.3760323													
13	Ratio Birge	0.89851805													
14	conclusion	le modèle est validé avec le test du Khi2													

Figure 27 - Feuille « GLS_GGMR » du fichier des données initiales

	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U		
1		Prévisions des valeurs de y																			
2		Compteur OLS				50	Compteur WLS				50	Compteur GLS				0	Compteur GLS_GGMR				16
3	date/heure	02-déc-15	14:37:50			date/heure	02-déc-15	14:45:50							date/heure	02-déc-15	18:10:27				
4	fichier x,y	enzèneC2015invcovmanu				fichier x,y	enzèneC2015invcovmanu								fichier x,y	enzèneC2015invcovmanu					
5	fichier x0	enzèneC2015invcovmanu				fichier x0	enzèneC2015invcovmanu								fichier x0	enzèneC2015invcovmanu					
6	méthode	OLS	d° poly.	1		méthode	WLS	d° poly.	2					méthode	GLS_GGMR	d° poly.	1				
7																					
8	x0	ux0	Prév y0	u(Prév y0)		x0	ux0	Prév y0	u(Prév y0)					x0	ux0	Prév y0	u(Prév y0)				
9	750000	0	458.482196	0.49671577		750000	0	459.409382	2.53627316					750000	0	457.657304	8.27093788				
10	800000	0	488.761199	0.47732585		800000	0	489.776773	2.62088303					800000	0	487.981374	8.81565219				
11	910000	0	555.375007	0.51181703		910000	0	556.237158	2.59164064					910000	0	554.694329	10.0171018				
12	1000000	0	609.877213	0.60601751		1000000	0	610.258058	2.80124136					1000000	0	609.277655	11.0024726				
13	1100000	0	670.43522	0.7522925		1100000	0	669.905735	4.03815585					1100000	0	669.925795	12.099149				
14																					
15																					
16	date/heure	14-déc-15	18:25:08			date/heure	14-déc-15	10:53:04													
17	fichier x,y	BenzèneC2015invcovman				fichier x,y	BenzèneC2015invcovman														
18	fichier x0	BenzèneC2015invcovman				fichier x0	BenzèneC2015invcovman														
19	méthode	OLS	d° poly.	1		méthode	WLS	d° poly.	2					méthode	GLS_GGMR	d° poly.	1				

Figure 28 - Feuille de sauvegarde des prévisions y_0

7 NOTATIONS UTILISEES

Cette annexe présente les notations utilisées dans le manuel et les annexes suivantes.

Vecteur des valeurs y_i

y_i indication ou valeur observée d'une réponse de l'instrument ($i = 1, \dots, n$)

Vecteur des n indications utilisées pour estimer la fonction d'étalonnage

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n \end{pmatrix} \quad (n \text{ lignes})$$

U_y matrice de variances-covariances associée aux n indications

$$U_y = \begin{pmatrix} u^2(y_1) & \cdots & u(y_1, y_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u(y_1, y_n) & \cdots & u^2(y_n) \end{pmatrix} \quad (n \text{ lignes}, n \text{ colonnes})$$

Les variances figurent sur la diagonale principale et les covariances sont les termes hors diagonale. La matrice est symétrique.

Autre notation de la covariance : $\text{cov}(y_i, y_j)$

Vecteur des valeurs x_i

x_i valeur numérique d'un étalon ($i = 1, \dots, n$)

Vecteur des n valeurs-étalons utilisées pour estimer la fonction d'étalonnage

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{pmatrix} \quad (n \text{ lignes})$$

U_x matrice de variances-covariances associées aux n valeurs-étalons

$$U_x = \begin{pmatrix} u^2(x_1) & \cdots & u(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u(x_1, x_n) & \cdots & u^2(x_n) \end{pmatrix} \quad (n \text{ lignes}, n \text{ colonnes})$$

Polynôme de degré k

$$y = b_0 + b_1 x + \dots + b_k x^k \Rightarrow Y = Xb$$

Vecteur b et matrice X utilisés dans la régression polynomiale

$$b = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_k \end{pmatrix} \quad (k + 1 \text{ lignes})$$
$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^k \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_i & x_i^2 & \dots & x_i^k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^k \end{pmatrix} \quad (n \text{ lignes}, k + 1 \text{ colonnes})$$

Estimateurs : matrice de variances-covariances

$$U_b = \begin{pmatrix} u^2(b_0) & \cdots & u(b_0, b_k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u(b_0, b_k) & \cdots & u^2(b_k) \end{pmatrix} \quad (k + 1 \text{ lignes}, k + 1 \text{ colonnes})$$

Les variances des coefficients estimés figurent sur la diagonale principale et les covariances sont les termes hors diagonale. La matrice est symétrique.

Vecteur des écarts

$$V = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \cdot \\ \cdot \\ y_n - f(x_n) \end{pmatrix} \quad (n \text{ lignes})$$

Prévision directe

$Prév y_0 = f(x_0)$ prévision d'une valeur de la variable y obtenue à la valeur x_0

$u(Prév y_0)$ incertitude associée

Prévision inverse

$Prév x_0 = f^{-1}(y_0)$ prévision d'une valeur x obtenue à la valeur y_0

L'inversion de la fonction donne k solutions correspondant au degré k du polynôme. Ces solutions sont notées : Sol 1, ..., Sol k.

En général, une seule de ces solutions est Prév x_0 recherchée par l'utilisateur.

$u(Prév x_0)$ incertitude associée

8 QUELQUES FORMULES DE CALCUL

La validité des tests statistiques indiqués dans cette partie repose sur l'hypothèse de normalité des variables : y (OLS, WLS, GLS_simples) et x,y (GLS_GGMR).

8.1 - OLS (Moindres carrés ordinaires)

. principe : minimiser la **somme des carrés des résidus** (SCR) en y entre les points et le polynôme

$$\text{Min}_b \sum_i (y_i - f(x_i))^2 = \text{Min} (V'V) = \text{Min SCR}$$

. validation globale du polynôme estimé : le rapport de la variance expliquée à la variance résiduelle noté F

$$F = s^2_{y_expliqué} / s^2_{y_OLS} \quad (\text{avec } s^2_{y_expliqué} = (y'_{expliqué} y_{expliqué}) / k)$$

suit une loi de Fisher à $(k, n - (k+1))$ degrés de liberté.

On vérifie que ce rapport n'est pas trop faible avec un test de Fisher unilatéral de niveau de signification $\alpha = 5\%$. Si F dépasse le quantile de 95 % de la loi de Fisher à $(k, n - (k+1))$ degrés de liberté, le modèle explique les données.

. expression des estimateurs :

- coefficients : $b_{OLS} = (X'X)^{-1}X'Y$
- matrice de variances-covariances associée : $U_{b_{OLS}} = s_{y,OLS}^2(X'X)^{-1}$
- variance résiduelle (variance des écarts) $s_{y,OLS}^2 = SCR / (n - (k + 1))$
 $s_{y,OLS}$ est l'estimation de $u(y)$ pour toutes les valeurs de y

. cas d'une droite :

$$\text{Min}_{b_0, b_1} SCR = \text{Min} \sum_i (y_i - (b_0 + b_1 \cdot x_i))^2$$

$$\text{variance résiduelle } s_{y,OLS}^2 = SCR / (n - 2)$$

$$\text{résidu normalisé (réduit)} : v_i / s_{y,OLS}$$

8.2 - WLS (Moindres carrés pondérés)

. principe : minimiser la **somme pondérée des carrés des résidus** (SCR_{Uy}) en y entre les points et le polynôme.

$$\text{Min}_b \sum_i u^2(y_i)(y_i - f(x_i))^2 = \text{Min} (V'U_y^{-1}V) = \text{Min } SCR_{Uy}$$

. validation globale du polynôme estimé : SCR_{Uy} est une variable du Khi2 à $(n - k - 1)$ degrés de liberté. Il est vérifié qu'elle est comprise dans son intervalle de confiance à 90 % (test bilatéral de niveau $\alpha = 10\%$) ; soit qu'elle n'est ni trop faible, ni trop élevée.

Dans (1) § 9, le test est unilatéral – le Khi2 ne doit pas être trop élevé – de niveau $\alpha = 5\%$. Si bien que la borne supérieure du test réalisé ici coïncide avec celle calculée dans (1).

On peut lui associer le **Ratio de Birge** dont la valeur attendue est 1 quels que soient le degré du polynôme et le nombre de points.

$$\text{Ratio de Birge} = \sqrt{\frac{SCR_{Uy}}{n - k - 1}}$$

remarque : le Ratio de Birge a une expression très proche de celle de l'écart type résiduel des OLS.

. expression des estimateurs

- coefficients $b_{WLS} = (X'U_y^{-1}X)^{-1}X'U_y^{-1}Y$
- matrice de variances-covariances associée : $U_{b_{WLS}} = (X'U_y^{-1}X)^{-1}$

. cas d'une droite :

$$\text{Min SCR}_{U_y} = \text{Min}_{b_0, b_1} \sum \frac{1}{u^2(y_i)} (Y_i - (b_0 + b_1 \cdot X_i))^2$$

résidu pondéré : $v_i / u(y_i)$

. remarque : de nombreux logiciels utilisent une présentation différente des WLS dans laquelle, les incertitudes des y sont supposées connues à une constante près. Dans ce cas, les incertitudes des estimateurs sont calculées avec la formule suivante :

$$U_{b_{WLS}} = s^2 (X' U_y^{-1} X)^{-1}$$

où s est le Ratio de Birge.

8.3 - GLS simples (Moindres carrés généralisés)

Idem WLS avec U_y non diagonale

. principe : minimiser **une forme quadratique** composée des écarts en y entre les points et le polynôme, et des variances-covariances de ces écarts :

$$\text{Min}_b (y - f(x))' U_y^{-1} (y - f(x)) = \text{Min}_b V' U_y^{-1} V = \text{Min SCR}_{U_y}$$

. expression des estimateurs

$$b_{\text{GLS_simples}} = (X' U_y^{-1} X)^{-1} X' U_y^{-1} Y \quad \text{et} \quad U_{b_{\text{GLS_simples}}} = (X' U_y^{-1} X)^{-1}$$

8.4 - GLS GGMR (Moindres carrés généralisés avec incertitude sur x)

. principe : minimiser une forme quadratique composée des **écarts en x et en y** entre les points et le polynôme, et des variances-covariances de ces écarts.

$$\text{Min}_{b,x} S(b,x) = \text{Min SCR}_U = \text{Min}_{b,x} f'_{b,x} U^{-1} f_{b,x}$$

où U^{-1} est l'inverse de la matrice des incertitudes associées à x et à y.

Dans le cas d'une droite, les écarts en x et en y s'écrivent :

$$f_{b,x} = \begin{pmatrix} X_1 - x_1 \\ \vdots \\ X_n - x_n \\ Y_1 - (b_0 + b_1 \cdot x_1) \\ \vdots \\ Y_n - (b_0 + b_1 \cdot x_n) \end{pmatrix} \quad (2n \text{ lignes})$$

. validation globale du polynôme estimé : même test que dans le cas WLS, avec les statistiques suivantes :

$$\text{SCR}_U \quad \text{et} \quad \text{Ratio de Birge} = \sqrt{\frac{\text{SCR}_U}{2n - n - k - 1}}$$

. expression des estimateurs : le système est résolu avec une méthode d'analyse numérique (méthode de Gauss-Newton). Il n'existe pas d'expression analytique pour les estimateurs.

8.5 - Prévision y_0 (valeur moyenne)

. cas d'une droite : $Prév y_0 = b_0 + b_1 x_0$

Source d'incertitude	Composante	Expression
coefficients de la fonction	$u_f(Prév y_0)$	$(u^2(b_0) + x_0^2 \cdot u^2(b_1) + 2 \cdot x_0 \cdot u(b_0, b_1))^{1/2}$
prédicteur x_0	$u_{x_0}(Prév y_0)$	$b_1 \cdot u(x_0)$
prévision $Prév y_0$ individuelle	composante non prise en charge par LNE-RegPoly	

Les composantes supposées indépendante sont sommées quadratiquement.

. cas d'un polynôme de degré 2 : $Prév y_0 = b_0 + b_1 x_0 + b_2 x_0^2$

Composante	Expression
$u_f(Prév y_0)$	$(u^2(b_0) + u^2(b_1)x_0^2 + u^2(b_2) x_0^4 + 2 x_0 u(b_0, b_1) + 2x_0^2 u(b_0, b_2) + 2x_0^3 u(b_1, b_2))^{1/2}$
$u_{x_0}(Prév y_0)$	$(b_1^2 \cdot u^2(x_0) + b_2^2 \cdot u^2(x_0^2))^{1/2} = (b_1^2 \cdot u^2(x_0) + b_2^2 \cdot 4 \cdot x_0^2 \cdot u^2(x_0))^{1/2}$

. cas d'un polynôme de degré quelconque : les deux composantes d'incertitude sont évaluées avec les outils matriciels.

Composante	Expression
$u_f(Prév y_0)$	$(X_0 U_b X_0')^{1/2}$
$u_{x_0}(Prév y_0)$	$(J_{x_0} J'_{x_0})^{1/2} u(x_0)$

où $X_0 = (1, x_0, x_0^2, \dots, x_0^k)$ est un vecteur à (k+1) colonnes formé des dérivées partielles de f par rapport à b

$J_{x_0} = (b_1, 2b_2 x_0, 3b_3 x_0^2, 4b_4 x_0^3, \dots, k b_k x_0^{k-1})$ est un vecteur à (k+1) colonnes formé des dérivées partielles de f par rapport aux termes en x_0 .

. incertitude du polynôme : elle est obtenue en reliant les intervalles d'incertitude élargie d'un ensemble de points du domaine.

L'incertitude élargie d'un point $Prév y_0$ est :

$$U(Prév y_0) = k \times u(Prév y_0)$$

où $k = 2$ sauf dans le cas des OLS.

OLS : k correspond au quantile à 0,975 % d'un Student à ddl = n - (k+1). Il dépend donc du nombre de données et du degré du polynôme.

8.6 - Prév x_0 (valeur moyenne)

. cas d'une droite

$$\text{Prév } x_0 = \frac{y_0 - b_0}{b_1}$$

incertitude type calculée avec la droite et y_0

$$u(\text{Prév } x_0) = \sqrt{[u^2(b_0) + \text{Prév } x_0^2 \cdot u^2(b_1) + 2 \cdot \text{Prév } x_0 \cdot u(b_0, b_1) + u^2(y_0)] / b_1^2}$$

. cas d'un polynôme de degré $k > 1$

La valeur Prév x_0 est obtenue en résolvant l'équation :

$$y_0 - (b_0 + b_1 \cdot (\text{Prév } x_0) + \dots + b_k \cdot (\text{Prév } x_0)^k) = 0$$

Le nombre de solutions est au maximum k . Ces k solutions ne sont pas toutes des nombres réels. En général, Prév x_0 est une des solutions réelles.

Lorsqu'une solution est un nombre réel, son incertitude type est calculée avec la somme quadratique des deux composantes suivantes :

Composante	Expression
$u_f(\text{Prév } x_0)$	$(J_{x_0}^{-1} J_b U_b J_b' J_{x_0}^{-1})^{1/2}$
$u_{y_0}(\text{Prév } x_0)$	$\frac{u(y_0)}{f'(\text{Prév } x_0)}$

où $f'(\text{Prév } x_0)$ est la dérivée de f évaluée à Prév x_0 .

9 BIBLIOGRAPHIE

- (1) "The determination and use of straight-line calibration functions", ISO/DTS TS 28037 2009 – 01 – 21 (L'AFNOR a édité une version française en 2015).
- (2) M J T Milton, p M Harris, I M Smith, A S Brown and B A Goody, "Implementation of a generalized least-squares method for determining calibration curves from data with general uncertainty structures", Metrologia, 43, 2006, S291-S298.
- (3) C. Yardin, "Estimer la droite d'étalonnage avec les moindres carrés généralisés et évaluer le résultat de mesure", Revue Française de Métrologie, Volume 2012 – 3, n°31, pp. 21 – 39, (2013)
- (4) ISO, NF ENV 13005, Août 1999, "Guide pour l'expression de l'incertitude de mesure" (GUM)