

A propos de la méthode des moindres carrés

par Yves CORTIAL
44600 Saint-Nazaire

Dans le BUP n° 702 est paru un article écrit par Monsieur Charles Ruhla sur «L'anamorphose» (cf référence I).

Il s'agit d'un rappel sur une méthode très classique de vérification d'un **Modèle** mathématique suivi par une loi physique.

La méthode des Moindres Carrés : (loi à deux paramètres).

On se limite, ici, au cas d'une fonction à une seule variable et à deux paramètres, mais la discussion est générale.

Ainsi, après linéarisation éventuelle de la fonction Modèle : $y = F(x)$ sous la forme : $g(x, y) = c \cdot h(x, y) + d$, on contrôle l'alignement des points expérimentaux en recherchant la « meilleure » droite passant au voisinage de ces points. On en déduit les valeurs approchées de c et d qui permettront, le plus souvent, de paramétrer le phénomène physique.

En plus de la méthode graphique simpliste, mais très efficace, qui consiste à placer intuitivement une droite le long du nuage de points, on est tenté d'exploiter par des procédés numériques (à l'aide d'une calculatrice ou d'un ordinateur), des outils plus théoriques d'origine statistique.

Il s'agit, en fait, de la Régression Linéaire classique par la méthode des Moindres Carrés décrite dans tous les ouvrages spécialisés (cf référence IV a).

Cependant, même sans volonté de rigueur mathématique, l'estimation convergente, sans biais et efficace, des paramètres c et d suppose le respect de conditions restrictives pour les grandeurs g et h déduites des mesures physiques :

* la grandeur h doit être affectée d'une erreur expérimentale **négligeable**.

* chaque résultat expérimental $\hat{g}$ de la grandeur g est affecté d'une erreur aléatoire. Ces erreurs doivent être **indépendantes**, de valeur moyenne nulle et de **variance identique** pour toutes les mesures.

* l'interprétation statistique des résultats n'est simple que pour une répartition des erreurs voisine de la **Loi Normale**.

On obtient alors un paramètre fondamental, le **coefficient de corrélation** ρ compris entre -1 et $+1$ et dont la valeur absolue devrait être proche de l'unité pour des points correctement alignés.

Il faut cependant remarquer que ce n'est pas un **critère** suffisant pour discuter la validité du **modèle** proposé. En effet, la valeur limite à exiger pour ρ dépend beaucoup de la qualité des mesures et du phénomène considéré.

Ainsi $|\rho| = 0,90$ pourra éventuellement suffire, alors que, dans un autre cas, $|\rho| = 0,998$ correspondra à un modèle erroné (cf exemple en annexe).

On peut même mettre ce critère complètement en défaut dans le cas d'une droite de pente quasi nulle, par exemple dans l'étude du produit $PV = F(P)$ pour une isotherme d'un gaz réel sous des pressions faibles. Il y a alors **non**-corrélation entre les variables et le ρ trouvé sera nul pour PV strictement constant.

Principe d'une méthode moins restrictive :

La méthode proposée ci-dessous, a été inspirée par une communication de Monsieur Trigeassou effectuée au cours des **Troisièmes Journées «Informatique et Pédagogie des Sciences Physiques»** dont le compte-rendu est diffusé par l'UdP (cf référence III a).

L'idée fondamentale est de trouver un **critère simple** qui tienne compte de la réalité physique des mesures expérimentales et qu'il faudra **optimiser** avant le contrôle de la validité du modèle proposé.

On étudie, ici, le cas d'une grandeur y en fonction d'une variable x (par exemple, une tension en fonction d'une intensité). On obtient

alors n couples de résultats de mesure $(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$ répartis dans le domaine considéré.

On admettra que les erreurs sur ces mesures sont **indépendantes** et de répartition voisine de la **Loi Normale** mais d'écart type variable. Cependant, il sera en général difficile de calculer avec précision ces écarts type et on se contentera d'une évaluation plus ou moins grossière (mais cohérente) de l'erreur prévisible sur la grandeur considérée. Ainsi les calculs non statistiques classiques de «l'erreur absolue» permettront une approximation suffisante.*

On appellera ex_i et ey_i les évaluations des erreurs correspondantes aux mesures $\hat{x}_i$ et $\hat{y}_i$.

Dans ces hypothèses, on se propose de vérifier si un modèle mathématique décrit correctement le phénomène physique. Ce modèle sera représenté par une fonction quelconque mais suffisamment «régulière» qui pourra dépendre de deux paramètres inconnus a et b et que l'on notera : $y = F_{ab}(x)$.

Il s'agit, alors, de déterminer a et b de sorte que le modèle corresponde le mieux possible aux résultats expérimentaux. Pour cela, **on cherchera à minimiser le critère choisi.**

Choix d'un critère :

Dans les hypothèses, on proposera ici la relation suivante :

$$\text{Critère} = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n \frac{[\hat{y}_i - F_{ab}(\hat{x}_i)]^2}{[ey_i]^2 + [F'_{ab}(\hat{x}_i) \cdot ex_i]^2}$$

où $F'_{ab}(x) = \frac{d}{dx} [F_{ab}(x)]$ est la dérivée avec les paramètres a et b constants.

La division par $(n - 2)$, nombre de degrés de liberté du système

* Pour une meilleure évaluation, on pourra utiliser l'article de Messieurs GIÉ et MOREAU paru dans le BUP 691 (cf référence II)

pour l'application du test du χ^2 , «normalise» le critère et rend son ordre de grandeur indépendant du nombre de mesures.

Il est facile de montrer la cohérence de ce critère avec la méthode des Moindres Carrés.

Ainsi, pour une fonction linéaire, s'il n'y a pas d'erreur sur les $\hat{x}_i$ et si les écarts type sur les $\hat{y}_i$ sont tous égaux à e_y fixé, on peut écrire :

$$\text{Critère} = \frac{1}{(n-2) \cdot e_y^2} \sum_{i=1}^n \left[\hat{y}_i - F_{ab}(\hat{x}_i) \right]^2$$

On voit alors que minimiser le critère revient à minimiser la somme des résidus (ou **critère quadratique**), ce qui est conforme au principe même de la méthode des Moindres Carrés.

De même, si les écarts type e_{y_i} sur les $\hat{y}_i$ sont variables, on retrouve le critère amélioré proposé dans la référence IV a :

$$\sum_{i=1}^n \frac{\left[\hat{y}_i - F_{ab}(\hat{x}_i) \right]^2}{\left[e_{y_i} \right]^2}$$

Par contre, le critère choisi fait jouer un rôle symétrique aux variables x et y .

En effet, si $y = F_{ab}(x) = a x + b$ avec des erreurs négligeables sur les $\hat{y}_i$ et un écart type e_x fixé sur tous les $\hat{x}_i$, on peut écrire :

$$\text{Critère} = \frac{1}{(n-2) \cdot e_x^2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - (a \hat{x}_i + b)}{a} \right]^2$$

Soit :

$$\text{Critère} \cdot (n-2) \cdot e_x^2 = \sum \left[\hat{x}_i - \frac{1}{a} (y_i - b) \right]^2 = \sum \left[\hat{x}_i - F_{ab}^{-1}(y_i) \right]^2$$

Justification du critère proposé :

Elle s'appuie sur la théorie dite du **Maximum de Vraisemblance** exposée en particulier dans l'ouvrage «Éléments de modélisation et traitement primaire des données» paru aux Éditions MIR (cf référence IV a).

On considère le voisinage d'un point de mesure expérimental $(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$, ce qui permettra l'approximation linéaire suivante :

$$y = F_{ab}(x) \approx \alpha x + \beta \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{dF_{ab}}{dx}(\hat{x}_i) = F'_{ab}(\hat{x}_i)$$

Les densités de probabilité P_i' et P_i'' des grandeurs effectives x_i et y_i correspondantes au point mesuré $(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$ sont indépendantes et gaussiennes d'écarts type ex_i et ey_i .

On utilisera le changement de variables suivant :

$$X_i = x_i - \hat{x}_i \quad \text{et} \quad Y_i = y_i - \hat{y}_i$$

tel que la droite précédente s'écrive :

$$Y_i = \alpha X_i + \beta' \quad (1) \quad \text{avec} \quad \beta' = \hat{y}_i - F_{ab}(\hat{x}_i)$$

On pourra donc écrire la densité globale pour le point (x_i, y_i) :

$$P_i = P_i' \cdot P_i'' = K_i' e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X_i}{ex_i} \right)^2} \cdot K_i'' e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{Y_i}{ey_i} \right)^2}$$

Soit :

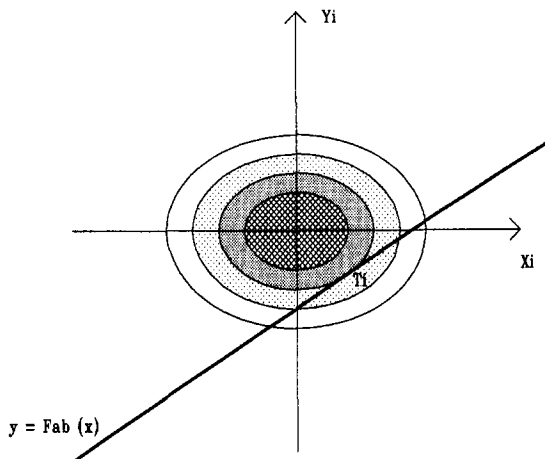
$$P_i = K_i e^{-\frac{1}{2} \left[\left(\frac{X_i}{ex_i} \right)^2 + \left(\frac{Y_i}{ey_i} \right)^2 \right]}$$

Les courbes d'isodensité $P_i = P_0$ correspondent à des ellipses homothétiques, de même centre $(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$, d'axes parallèles à Ox et Oy , et d'équations :

$$\left(\frac{X_i}{ex_i} \right)^2 + \left(\frac{Y_i}{ey_i} \right)^2 = C_i \quad (2)$$

La décroissance de la constante c_i provoque une diminution correspondante des demi-axes $ex_i \cdot \sqrt{C_i}$ et $ey_i \cdot \sqrt{C_i}$ des **ellipses de dispersion** et une augmentation de la densité.

On recherche, alors, le point le plus probable sur la courbe $y = F_{ab}(x)$. Il s'agit de son point de tangence T_i avec la plus petite possible des ellipses précédentes (cf figure).



Ellipses de dispersion autour d'un point expérimental :

En T_i , on peut écrire que la tangente est commune. Soit :

$$(1) \Rightarrow \frac{d Y_i}{d X_i} = \alpha \quad \text{et} \quad (2) \Rightarrow \frac{d Y_i}{d X_i} = - \frac{X_i}{Y_i} \left(\frac{ey_i}{ex_i} \right)^2$$

D'où $X_i = -\alpha Y_i \left(\frac{ex_i}{ey_i} \right)^2$ à reporter dans :

$$Y_i = \frac{(ey_i)^2 \beta}{\{(ey_i)^2 + \alpha^2 (ex_i)^2\}} \quad (1)$$

$$(Y_i)^2 \{(ey_i)^2 + \alpha^2 (ex_i)^2\} = c_i (ey_i)^4 \quad (2)$$

Soit :

$$C_i = \frac{\beta^2}{\{(ey_i)^2 + \alpha^2(ex_i)^2\}} = \frac{(\hat{y}_i - F_{ab}(\hat{x}_i))^2}{\{(ey_i)^2 + (F'_{ab}(\hat{x}_i))^2 \cdot (ex_i)^2\}}$$

Pour l'ensemble des points de mesure, les erreurs étant indépendantes, on obtient la densité de probabilité totale par le produit :

$$pt = \prod_{i=1}^n \pi = K e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{X_i}{ex_i} \right)^2 + \left(\frac{Y_i}{ey_i} \right)^2 \right]}$$

La densité maximale est obtenue pour le minimum de la somme suivante :

$$\sum_{i=1}^n \left[\left(\frac{X_i}{ex_i} \right)^2 + \left(\frac{Y_i}{ey_i} \right)^2 \right] = \sum_{i=1}^n C_i$$

Ce minimum est obtenu en ajustant les paramètres a et b de la courbe $y = F_{ab}(x)$ choisie, de telle sorte que les ellipses précédentes soient les plus petites possibles et que la somme des contributions soit minimale.

On reconnaît ici, à un facteur multiplicatif $(n-2)$ près, la définition du critère choisi.

Présentation du logiciel MODÈLE :

La mise en pratique des idées précédentes impose l'emploi de moyens numériques informatiques.

Le logiciel MODÈLE correspondant a été testé par des élèves de Math Spé. TA au cours de séances de Travaux Pratiques de Mécanique.

Cependant, l'auteur n'étant ni un informaticien, ni un spécialiste des mathématiques appliquées, la version proposée ne peut être qu'un prototype à l'ergonomie et à la fiabilité discutables.

Elle a été écrite sur un compatible IBM PC en langage TURBO PASCAL complété par la bibliothèque MODULOG. De longs calculs itératifs exigeant une grande précision individuelle, la version avec coprocesseur arithmétique peut se révéler utile.

Les représentations graphiques s'accommodent (comme MODULOG) des écrans classiques (HERCULE, CGA, et EGA) et le programme a été complété par une copie d'écran graphique logicielle pour les imprimantes au standard EPSON.

Les diverses informations introduites au cours de l'utilisation du logiciel, peuvent être sauvegardées sur disque en vue d'une utilisation ultérieure.

Il faut, au préalable, préciser la fonction modèle choisie : $y = F_{ab}(x)$ et sa forme linéarisée éventuelle.

Ensuite, l'utilisateur introduit les divers points expérimentaux et l'évaluation des erreurs correspondantes.

A la fin de la saisie, dans le cas d'une fonction linéarisable, le programme propose d'effectuer l'initialisation automatique des calculs à l'aide de la méthode des Moindres Carrés. Le graphe de la droite correspondante est alors disponible et permet de vérifier la validité de l'alignement prévu des points expérimentaux.

Il est toujours possible de proposer une initialisation différente basée sur les connaissances a priori de l'expérimentateur.

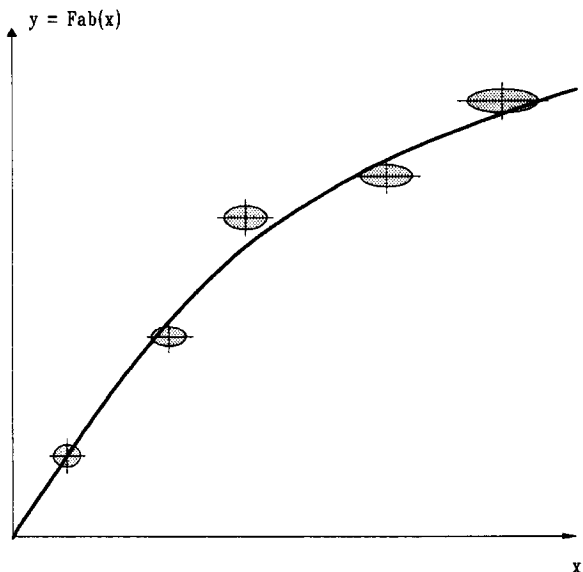
Cette étape une fois réalisée, la recherche itérative du minimum du critère est effectuée. Puis ce minimum est affiché avec les valeurs correspondantes des paramètres a et b . De plus, le tableau des données numériques est complété, pour chaque mesure, par sa contribution à la somme définissant le critère, ce qui permet de détecter les valeurs aberrantes éventuelles.

On peut, alors, obtenir une représentation graphique de la fonction modèle en présence des points expérimentaux $(\hat{x}_i, \hat{y}_i)$. Ceux-ci sont représentés par l'intersection de deux segments de longueurs $(2. ex_i)$ et $(2. ey_i)$ parallèles à Ox et Oy . Ces segments sont représentatifs des

erreurs estimées de la mesure car ce sont les axes de l'**ellipse de dispersion unitaire** :

$$\left(\frac{x_i - \hat{x}_i}{ex_i} \right)^2 + \left(\frac{y_i - \hat{y}_i}{ey_i} \right)^2 = 1$$

Un modèle correct supposera donc que la courbe $Y = F_{ab}(x)$ passe dans ces ellipses ou à leur voisinage, ce qui correspond à un critère voisin de 1 (cf figure).



Ellipses de dispersion unitaires :

Validité des résultats obtenus :

Plus précisément, on peut appliquer la loi de distribution du χ^2 au critère obtenu. Pour un modèle «correct», la probabilité d'obtenir un critère supérieur à une valeur donnée est une fonction rapidement décroissante de cette valeur (cf référence IV b).

Une probabilité faible devrait permettre d'éliminer le modèle

proposé comme trop improbable, mais, du fait des approximations faites en particulier sur l'évaluation des écarts type, un critère supérieur peut se révéler satisfaisant.

La minimisation du critère choisi conduit aux valeurs optimales correspondantes des paramètres a et b. On peut vouloir évaluer les incertitudes sur cette détermination. Malheureusement, il n'y a pas de théorie simple dans le cas général et on est réduit à étudier l'évolution du critère autour de son minimum.

Monsieur Trigeassou propose de tracer les courbes isocritères fermées au voisinage du minimum (cf référence III b). Le logiciel MODÈLE permet ainsi le calcul et l'affichage d'une telle courbe caractérisée par :

$$\text{critère} = (\text{critère minimal}). (1 + 3^2 / n) *$$

où n est le nombre de points de mesure expérimentaux.

La forme de cette courbe permet de montrer, en considérant son aplatissement et son orientation, les propriétés suivantes :

- * les erreurs sur les paramètres a et b ne sont pas indépendantes.
- * la détermination d'un des paramètres peut être plus précise que l'autre.

Cependant, les informations obtenues restent essentiellement qualitatives, une indétermination trop grande pouvant provenir de mesures incorrectes ou d'un modèle inadapté.

Conclusion :

L'objectif du logiciel proposé est de sensibiliser les élèves aux choix des méthodes expérimentales et à leur interprétation, de leur montrer l'importance des incertitudes sur les mesures sans leur imposer des considérations théoriques trop complexes, et de leur éviter le travail répétitif du tracé des courbes nécessaires à une bonne compréhension des phénomènes.

Les élèves, après un court apprentissage, se sont adaptés aux

* Conformément à la «règle des trois sigma» appliquée à a et b.

contraintes du logiciel. Ils l'utilisent pendant les séances de T.P. afin de leur permettre de refaire éventuellement d'autres mesures si les premières se révèlent fausses ou insuffisantes.

La rédaction du compte-rendu est facilitée, mais il faut exiger que celui-ci ne soit pas un simple catalogue de résultats numériques ou graphiques ; l'interprétation de ces résultats et de leur fiabilité restant le but fondamental des séances de travaux pratiques.

Bibliographie : *

- Référence I : C. RUHLA BUP n° 702 (mars 88) «L'anamorphose» page 309.

- Référence II : H. GIÉ et R. MOREAU BUP n° 691 (février 87) «Le calcul des incertitudes» page 159.

- Référence III : J. C. TRIGEASSOU 3^{èmes} Journées «Informatique et Pédagogie des Sciences Physiques» (INRP-UDP).

- a/ «Méthodes numériques : traitement des données / modélisation» page 25.

- b/ «Modélisation assistée par ordinateur : précision du modèle expérimental» page 141.

- Référence IV : S. AIVAZIAN, I. ENUKOV, L. MECHLKINE «Éléments de modélisation et traitement primaire des données» (éditions MIR),

- a/ chapitre 8 : Estimation statistique des paramètres p. 199,

- b/ chapitre 9 : 6.2.1. Loi du χ^2 p. 150.

ANNEXE

On propose ici un exemple d'utilisation tiré du livre «Exercices de Chimie Générale» de René DIDIER paru chez Lavoisier.

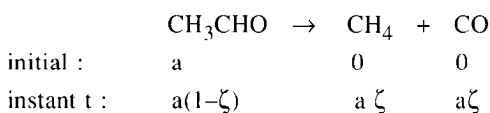
Il s'agit de l'étude expérimentale d'une cinétique chimique (exercice n° 11, page 130).

* Depuis la rédaction initiale de cet article, est paru chez LAVOISIER, le livre «Recherche de Modèles Expérimentaux» de J. C. TRIGEASSOU qui développe la théorie des Modèles et les méthodes pratiques d'optimisation appliquées au critère quadratique.

Énoncé du problème :

t (en min)	0	4,0	8,6	13,8	19,7	26,5	33,9
P (en cm Hg)	21,25	22,31	23,37	24,44	25,55	26,56	27,6

Le tableau précédent donne la pression totale P en fonction du temps t pour la réaction suivante (en phase gazeuse, à température et volume constants) :



$$\text{D'où } P = P_0 (1 + \zeta) \quad \text{avec} \quad P_0 = a R T = 21,25 \text{ cm Hg.}$$

1. HYPOTHÈSE DE L'ORDRE 1 :

(proposée par la solution)

Il faut alors appliquer l'équation différentielle :

$$\frac{d\zeta}{dt} = k (1 - \zeta) \quad \text{de solution:} \quad \left(2 - \frac{P}{P_0} \right) = e^{-kt}$$

Une simple calculatrice scientifique permet d'appliquer la méthode de Moindres Carrés selon :

$$g = c \cdot h + d \quad (1)$$

$$\text{avec :} \quad g = -\ln \left(2 - \frac{P}{21,25} \right) \quad (P \text{ en cm Hg})$$

$$h = t \quad (t \text{ en min})$$

On obtient :

$$c = 0,0010427 \text{ min}^{-1}$$

$$d = 0,01059$$

avec un facteur de corrélation : $\rho = 0,998$.

Ceci pourrait sembler satisfaisant jusqu'à ce que l'on considère les graphiques correspondants.

Premier problème :

Le tracé de $g = c.h + d$ (cf courbe 1.1) montre une répartition des écarts des points expérimentaux par rapport à la droite obtenue, selon une courbe trop **régulière** alors qu'ils devraient respecter une distribution **aléatoire**.

De plus, la courbe $t = -\ln\left(2 - \frac{P}{21,52}\right) \sqrt{0,010427(2)}$ (cf graphe 1.2) obtenue en remplaçant k par la valeur de c précédente ne correspond manifestement pas aux points mesurés, même si on leur attribue des incertitudes importantes en regard du nombre de chiffres significatifs proposés par l'énoncé, soit :

0,3 min pour les temps, 0,03 cm Hg pour les pressions.

Deuxième problème :

On a fait jouer, ici, un rôle particulier à la pression initiale P_0 :

La courbe (2) cherchée doit passer par le point correspondant alors que la mesure de P_0 est approchée, comme celle des autres pressions. D'ailleurs, la droite (1) ne passe pas par l'origine (d est non nul). En effet, la méthode consiste à optimiser c et d .

Il faudra donc en tenir compte dans le tracé de $t = F(P)$. Cependant, le résultat, bien que notablement amélioré, reste imparfait (cf graphe 1.3).

2. HYPOTHÈSE DE L'ORDRE 2

On a alors l'équation différentielle :

$$\frac{d\zeta}{dt} = k(1 - \zeta)^2 \text{ de solution } \left(2 - \frac{P}{P_0}\right) = \frac{1}{(k' t + 1)}$$

que l'on peut linéariser sous la forme $g = c.h + d$, soit :

$$\frac{1}{\left(2 - \frac{P}{21,25}\right)} = k' . t + 1$$

avec P en cm Hg, t en min et k' en min^{-1} .

L'utilisation du logiciel impose l'usage de notations particulières et on propose le changement de variables suivant :

$x = P$ et $y = t$ reliées par $y = F_{ab}(x)$ avec $a = k'$ et $b = P_0$.

On a alors :

$$y = \frac{1}{a} \cdot \left(\frac{1}{(2 - x/b)} - 1 \right)$$

mise sous la forme linéarisée $g(x, y) = c \cdot h(x, y) + d$ avec :

$$g = \frac{1}{\left(2 - \frac{x}{21,25} \right)}$$

$$h = y$$

$$a = c$$

$$b = 21,25$$

(la valeur de d obtenue devant être voisine de 1).

L'application de la méthode des Moindres Carrés conduit aux valeurs suivantes (cf tableau 2.1) :

$$c = 0,01253 \text{ min}^{-1} \text{ et } d = 1,0021$$

avec un facteur de corrélation très proche de 1 ($p = 0,9996$). On remarquera que le critère choisi vaut 0,464, ce qui suppose une bonne représentation du phénomène par l'hypothèse proposée.

En effet, le graphe de la droite $g = c \cdot h + d$ montre l'alignement presque parfait des points expérimentaux (cf courbe 2.1).

Après optimisation du critère (qui tient compte de l'incertitude sur P_0), on obtient, avec le graphe de $y = F_{ab}(x)$ (cf courbe 2.2), les valeurs suivantes :

$$a = 0,012455 \text{ min}^{-1} \quad (= k')$$

$$b = 21,291 \text{ cm Hg} \quad (= P_0)$$

avec un critère égal à 0,133 (cf tableau 2.2).

Conclusion :

La comparaison des valeurs du critère obtenu pour les deux hypothèses est significative. En outre, on remarque que les deux valeurs sont respectivement, supérieure et inférieure à l'unité qui constitue la valeur de référence du critère proposé. Par contre, le facteur de corrélation est très proche de 1 dans les deux cas, et se révèle donc, non sélectif.

Dans le cadre de la deuxième hypothèse, l'optimisation itérative du critère conduit à une nouvelle amélioration (critère divisé par 3). On pourra comparer les distributions des contributions de chaque point expérimental à ce critère sur les tableaux 2.1 et 2.2.

La recherche de la courbe isocritère conduit au graphe 2.3. Elle permet d'évaluer l'ordre de grandeur prévisible des incertitudes relatives (non indépendantes) affectant les valeurs de a et b obtenues.

Il sera intéressant de comparer cette courbe avec celle du graphe 1.4 correspondant à la première estimation de a et b. On constate alors que les écarts relatifs sont dans un facteur 10 et que la courbe isocritère n'est pas centrée, ce qui confirme le décalage systématique de l'estimation initiale déjà signalé.

Tableau 1.1 :

i	x : P(cm Hg)	ex (cm Hg)	y : t (min)	ey (min)	(critère)
1 :	2.12500E+01	3.00E-02	0.00000E+00	3.00E-01	(0.00)
2 :	2.23100E+01	3.00E-02	4.00000E+00	3.00E-01	(7.47)
3 :	2.33700E+01	3.00E-02	8.60000E+00	3.00E-01	(19.44)
4 :	2.44400E+01	3.00E-02	1.38000E+01	3.00E-01	(28.08)
5 :	2.55000E+01	3.00E-02	1.97000E+01	3.00E-01	(24.39)
6 :	2.65600E+01	3.00E-02	2.65000E+01	3.00E-01	(9.44)
7 :	2.76000E+01	3.00E-02	3.39000E+01	3.00E-01	(0.17)

pour la fonction : $y = -\ln(2-x/b)/a$

a = 1.0427E-02 min⁻² b = 2.1250E+01 cm Hg (critère = 17.798)

Premier menu : choisir une option parmi : Ajouter, Corriger, Éliminer un point, Nouvelle fonction, mise à Zéro, Fin, Trier, Inf., Suite (A, C, E, N, F, Z, T, I, S) ? <S> S.

Selon la forme linéarisée $g(x, y) = c * h(x, y) + d$ avec :

$$g(x, y) = -\ln(2-x/21.25) \text{ et } h(x, y) = y$$

$$a(c, d) = c \text{ et } b(c, d) = 21.25$$

Initialisation automatique selon la méthode des Moindres Carrés (O/N) ? <O> Oui $c = 1.04268E-02$ et $d = 1.05916E-02$.

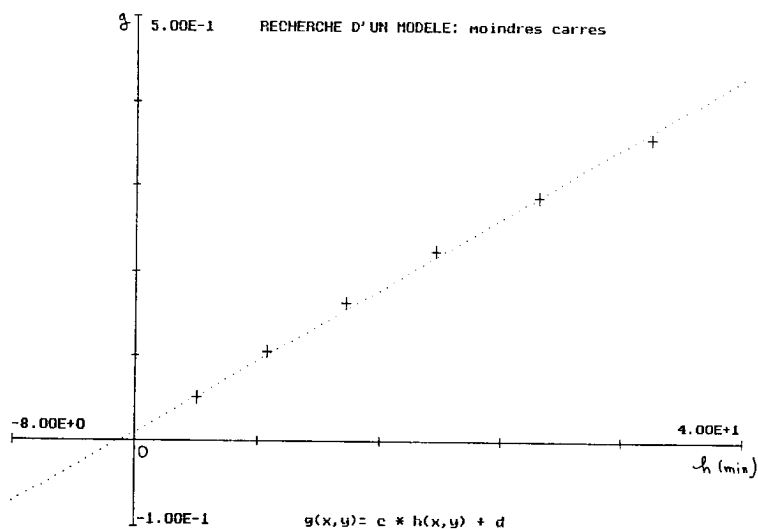
Point de départ de l'optimisation :

$$a0 = 1.04268E-02 \text{ min}^{-1} \text{ et } b0 = 2.12500E+01 \text{ cm Hg.}$$

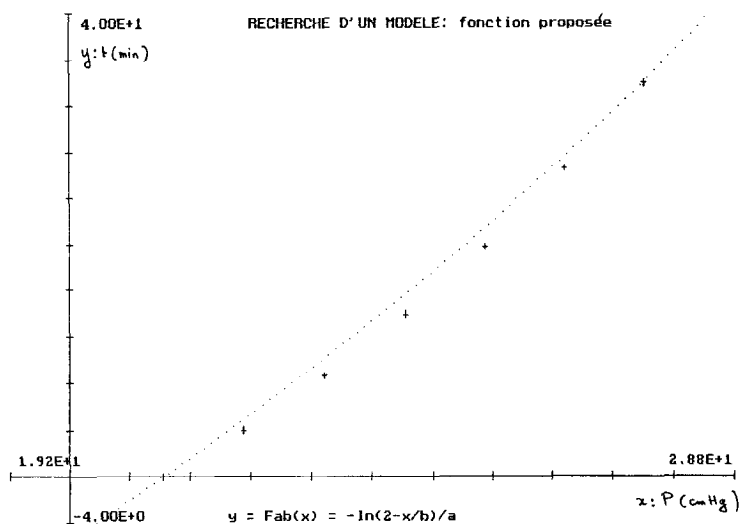
Corrélation : 0.998

critère : 17.798.

Graphe 1.1 :



Graphe 1.2 :



Graphe 1.3 :

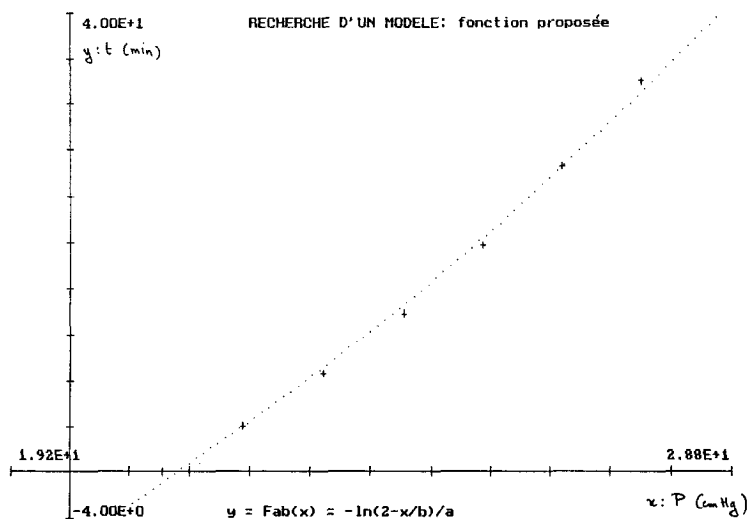


Tableau 2.1 :

i	x : P Cm Hg	ex (cm Hg)	y : t (min)	ey (min)	(critère)
1 :	2.12500E+01	3.00E-02	0.00000E+00	3.00E-01	(0.00)
2 :	2.23100E+01	3.00E-02	4.00000E+00	3.00E-01	(0.34)
3 :	2.33700E+01	3.00E-02	8.60000E+00	3.00E-01	(0.54)
4 :	2.44400E+01	3.00E-02	1.38000E+01	3.00E-01	(0.77)
5 :	2.55000E+01	3.00E-02	1.97000E+01	3.00E-01	(0.52)
6 :	2.65600E+01	3.00E-02	2.65000E+01	3.00E-01	(0.06)
7 :	2.76000E+01	3.00E-02	3.39000E+01	3.00E-01	(0.09)

pour la fonction : $y = (1 / (2 - x / b) - 1) / a$

$a = 1.2530E-02 \text{ min}^{-1}$ $b = 2.1250E+01 \text{ cm Hg}$ (critère = 0.464)

Premier menu : Choisir une option parmi : Ajouter, Corriger, Éliminer un point, Nouvelle fonction, mise à zéro, Fin, Trier, Inf., Suite (A, C, E, N, F, Z, T, I, S) ? <S> S.

Selon la forme linéarisée $g(x, y) = c * h(x, y) + d$ avec :

$g(x, y) = 1 / (2 - x / 21.25)$ et $h(x, y) = y$

$a(c, d) = c$ et $b(c, d) = 21.25$

Initialisation automatique selon la méthode des Moindres Carrés (O/N) ? <O> Oui $c = 1.25305E-02$ et $d = 1.00211E+00$.

Point de départ de l'optimisation :

$a0 = 1.25305E-02 \text{ min}^{-1}$ et $b0 = 2.12500E+01 \text{ cm Hg}$.

Corrélation : 1.00 critère : 0.464.

Voulez-vous le graphe $g = c * h + d$ (O/N) ? <O>.

Graph 2.1 :

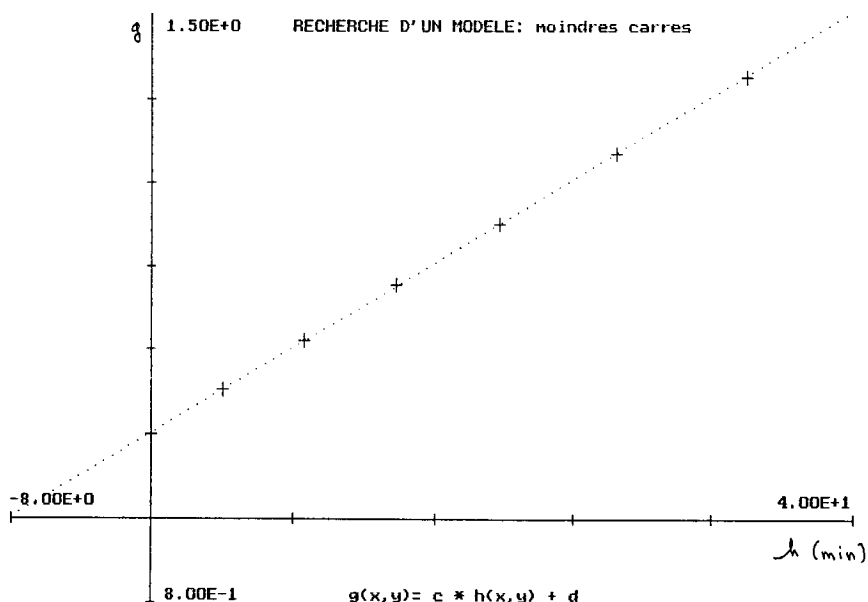


Tableau 2.2 :

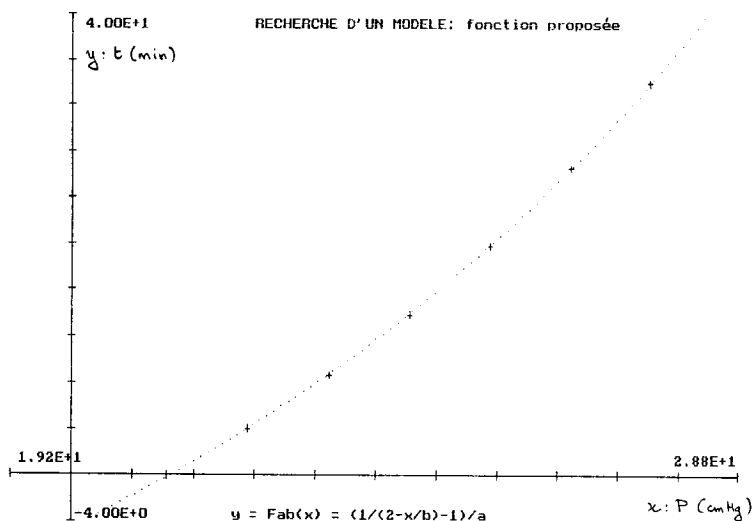
i	x : P (cm Hg)	ex (cm Hg)	y : t (min)	ey (min)	(critère)
1 :	2.12500E+01	3.00E-02	0.00000E+00	3.00E-01	(0.23)
2 :	2.23100E+01	3.00E-02	4.00000E+00	3.00E-01	(0.01)
3 :	2.33700E+01	3.00E-02	8.60000E+00	3.00E-01	(0.07)
4 :	2.44400E+01	3.00E-02	1.38000E+01	3.00E-01	(0.17)
5 :	2.55000E+01	3.00E-02	1.97000E+01	3.00E-01	(0.06)
6 :	2.65600E+01	3.00E-02	2.65000E+01	3.00E-01	(0.07)
7 :	2.76000E+01	3.00E-02	3.39000E+01	3.00E-01	(0.05)

pour la fonction : $y = (1 / (2 - x / b) - 1) / a$

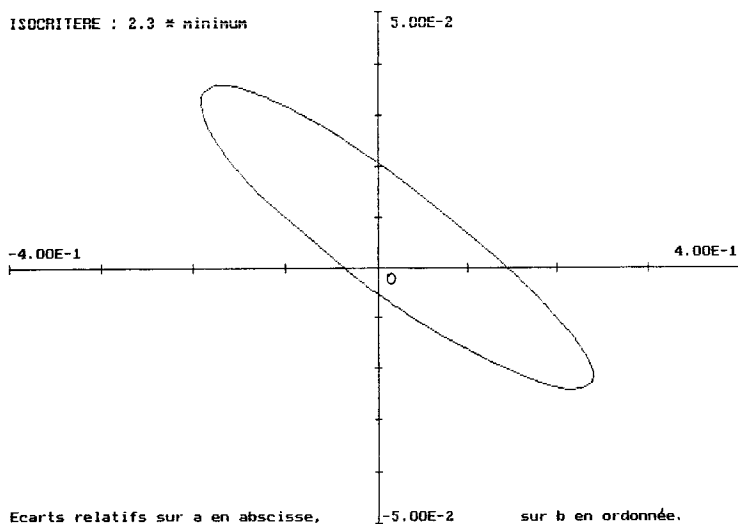
$a = 1.2455E-02 \text{ min}^{-1}$ $b = 2.129E+01 \text{ cm Hg}$ (critère = 0.133)

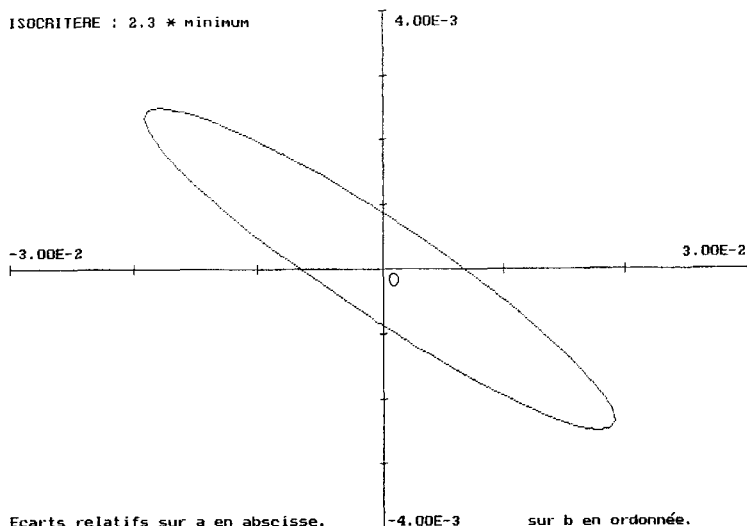
Deuxième menu : Choisir une option parmi : Graphe, Domaine d'incertitude, Inf., Enregistrement, Menu précédent, mise à zéro, Fin (G, D, I, E, M, Z, F) ? <G>

Graphe 2.2 :



Graphe 1.4 :



Graphe 2.3 :**ADDENDA**Relation avec la distribution du χ^2 de Pearson :

On suppose ici le problème complètement résolu, c'est-à-dire que la fonction modèle $y = F_{ab}(x)$ représente la loi de variation exacte (en fait compatible avec les valeurs expérimentales).

On se place au voisinage d'un point théorique (x_i, y_i) tel que $y_i = F_{ab}(x_i)$.

Soient $\hat{x}_i$ et $\hat{y}_i$, les mesures expérimentales obtenues pour x_i et y_i . On admettra l'hypothèse classique selon laquelle les erreurs de mesure $(\hat{x}_i - x_i)$ et $(\hat{y}_i - y_i)$ 55, sont des variables aléatoires indépendantes de distributions gaussiennes centrées et d'écart type ex_i et ey_i .

On introduit une nouvelle variable aléatoire :

$$z_i = \hat{y}_i - F_{ab}(\hat{x}_i) = (\hat{y}_i - y_i) - (F_{ab}(\hat{x}_i) - F_{ab}(x_i))$$

Sachant que $\hat{x}_i$ est voisin de x_i , on peut linéariser cette relation selon :

$$z_i \approx (\hat{y}_i - y_i) - F'_{ab}(x_i) \cdot (\hat{x}_i - x_i)$$

On obtient alors une combinaison linéaire des deux variables aléatoires indépendantes précédentes :

z_i est donc aussi une variable aléatoire gaussienne centrée et d'écart type donné par :

$$ez_i^2 = ey_i^2 + (F'_{ab}(x_i))^2 \cdot ex_i^2$$

Remarque : comme $F'_{ab}(x_i)$ peut être correctement estimé par $F'_{ab}(\hat{x}_i)$, on reconnaît le dénominateur des termes de la somme définissant le critère proposé précédemment.

A partir de z_i , on construit une variable aléatoire gaussienne centrée, réduite $\zeta_i = z_i / ez_i$ qui est bien d'espérance mathématique nulle et d'écart type unitaire.

En considérant n points différents (x_i, y_i) , et en faisant la somme des carrés des n variables aléatoires ζ_i dépendant des deux paramètres a et b , on obtient la loi du χ^2 à $(n-2)$ degrés de liberté :

$$\chi^2_{(n-2)} = \sum_{i=1}^n \zeta_i^2$$

Le critère proposé s'écrit donc :

$$\text{critère} = \frac{1}{n-2} \cdot \sum_{i=1}^n \zeta_i^2 = \frac{\chi^2_{(n-2)}}{n-2}$$

En se reportant aux tables donnant la distribution du χ^2 , on obtient typiquement pour des m de l'ordre de 10 ou légèrement inférieur, une probabilité :

$$P(\chi^2(m) > m) \approx 0,5$$

Donc, la probabilité pour que le critère dépasse l'unité est d'environ 50%.

Cette probabilité décroît rapidement avec des valeurs croissantes du critère, en effet, dans les mêmes conditions :

$$P(\chi^2(m) > 2.m) \approx 0,05$$

D'où la probabilité pour que le critère soit supérieur à 2, n'est plus que de 5%.

Toutefois, il faut se garder d'appliquer à la lettre ces conclusions car les propriétés utilisées ne sont qu'approchées. Les estimations obtenues seront donc biaisées et leur fiabilité discutable surtout pour un nombre trop faible de mesures.