

Une expérience pour la méthode des moindres carrés

par Jean-Louis BRETONNET
I.U.T. de Metz, 57000 Metz

INTRODUCTION

Au cours d'une expérience, les points expérimentaux qui peuvent être portés sur un graphe présentent généralement une certaine dispersion par rapport à la relation théorique. Le tracé d'une courbe régulière lissant ces points est donc un problème crucial qui doit être traité par des règles strictes.

En mathématiques, on apprend que par n points de coordonnées (x_i, y_i) on peut toujours mener une courbe passant exactement par chacun des points et s'exprimant analytiquement par un polynôme de degré $(n-1)$. Cependant une telle solution du problème n'est pas satisfaisante, car, presque toujours, la non régularité des points expérimentaux est conditionnée par les erreurs de mesure et non par la relation théorique qui existe entre y et x . Par conséquent, les données expérimentales doivent être traitées de façon à exprimer le plus exactement possible la tendance générale qui se dessine dans la relation entre y et x , tout en réduisant les écarts aléatoires dus aux erreurs de l'expérience.

Pour résoudre ce problème il y a lieu de choisir les coefficients de la relation $y = f(x)$ de manière qu'elle ajuste le mieux possible, dans un certain sens, les données expérimentales. En premier lieu, on doit établir ce que l'on considère être le meilleur critère d'approximation. Par exemple, on peut considérer comme la meilleure solution celle qui assure le minimum des écarts entre la courbe approchée et les points expérimentaux : c'est la meilleure approximation au sens de Tchebychev. Ou bien, on peut exiger que soit minimale la somme des valeurs absolues des écarts entre les points et la courbe. Cependant la méthode la plus employée est celle des moindres carrés. Cette méthode, qui repose sur un fondement probabiliste sérieux, consiste à rendre minimale la somme des carrés des écarts entre les points expérimentaux et la courbe de lissage. De plus, elle présente une analogie formelle

avec le principe du minimum d'énergie, dont on peut tirer parti pour rendre sa présentation plus attrayante.

LA RÉGRESSION LINÉAIRE

Dans le cas le plus simple où les valeurs de y semblent liées linéairement à celles de x , il s'agit de déterminer la droite, appelée droite de régression, qui ajuste les différents points expérimentaux.

Considérons les n points (x_i, y_i) représentatifs des résultats de n expériences, x_i étant la valeur de l'argument et y_i la valeur correspondante de la fonction. La méthode des moindres carrés va permettre d'évaluer les paramètres a et b de la droite de régression $Y = ax + b$, de manière que la somme des carrés des écarts entre les valeurs mesurées y_i et les valeurs Y_i , calculées à partir de la relation linéaire, soit minimale. En l'occurrence la somme S des carrés des écarts est définie par la quantité :

$$S = \sum_{i=1}^n (y_i - a x_i - b)^2 \quad (1)$$

Si b était connu a priori, on ne pourrait modifier que le paramètre a , et le minimum de S serait fourni par la relation :

$$\frac{\delta S}{\delta a} = 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a x_i - b)(-x_i) = 0 \quad (2)$$

Par contre si a était maintenu constant, on aurait :

$$\frac{\delta S}{\delta b} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a x_i - b) = 0 \quad (3)$$

Ces deux conditions donnent le système d'équations suivant :

$$\sum_{i=1}^n x_i y_i - a \sum_{i=1}^n x_i^2 - b \sum_{i=1}^n x_i = 0 \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^n y_i - a \sum_{i=1}^n x_i - b n = 0$$

à partir duquel on tire les valeurs de a et de b :

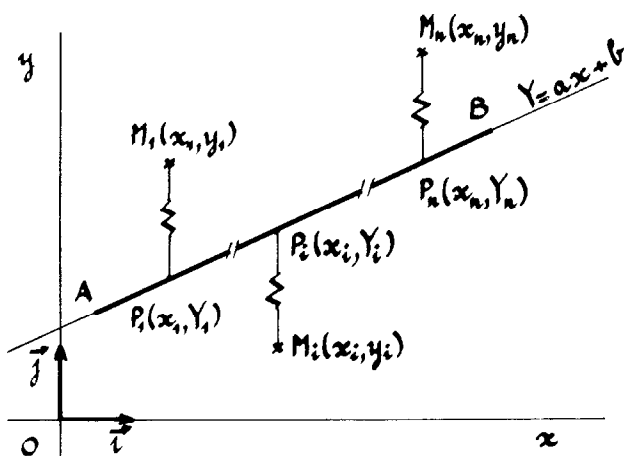
$$a = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (5)$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^n x_i^2 \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n x_i y_i \sum_{i=1}^n x_i}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2} \quad (6)$$

UNE ANALOGIE MÉCANIQUE

On peut obtenir l'équation de la droite de régression au moyen d'une expérience facile à réaliser avec une tige rigide et des ressorts. Supposons que la tige rigide rectiligne AB soit maintenue dans le plan vertical Oxy par n ressorts identiques (figure), possédant le même coefficient de rigidité K. La barre a un poids négligeable et les ressorts sont fixés respectivement entre les points fixes $M_i(x_i, y_i)$ et les points $P_i(x_i, Y_i)$ de la barre AB, de manière que les forces qu'ils exercent sur celle-ci soient de la forme :

$$\vec{F}_i = K \cdot \overline{P_i M_i} \cdot \vec{j} \quad (7)$$



Il se trouve qu'en position d'équilibre, la barre correspond exactement à la droite de régression qui ajuste les points $M_i(x_i, y_i)$ par la méthode des moindres carrés. Pour le montrer écrivons la condition d'équilibre de la barre AB après avoir calculé le torseur des forces appliquées :

$$\sum_i \vec{F}_i = K \sum_{i=1}^n \overrightarrow{P_i M_i} \bullet \vec{j} = \vec{0} \quad (8)$$

$$\sum_i (\overrightarrow{OM_i} \wedge \vec{F}_i) = K \sum_{i=1}^n (\overrightarrow{OM_i} \wedge \overrightarrow{P_i M_i} \bullet \vec{j}) = \vec{0}$$

Étant donné que les points $P_i(x_i, Y_i)$ appartiennent à la barre, ils vérifient la relation $Y_i = a x_i + b$ pour chaque valeur de l'abscisse x_i et le torseur des forces se réduit aux deux équations vectorielles suivantes :

$$\sum_i \vec{F}_i = K \sum_{i=1}^n (y_i - a x_i - b) \bullet \vec{j} = \vec{0} \quad (9)$$

$$\sum_i (\overrightarrow{OM_i} \wedge \vec{F}_i) = K \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a x_i - b) \bullet \vec{k} = \vec{0}$$

Après simplification on aboutit finalement au système d'équations (4) qui a été obtenu par la méthode des moindres carrés. La position d'équilibre de la barre AB est donc celle de la droite qui représente le meilleur ajustement linéaire des points $M_i(x_i, y_i)$ au sens des moindres carrés.

D'ailleurs ce résultat est encore plus frappant lorsqu'on étudie le système du point de vue énergétique. En effet, la position d'équilibre du système mécanique n'est atteinte que si son énergie est minimum. Comme celle-ci est composée uniquement de l'énergie potentielle :

$$U = -\frac{K}{2} \sum_i \overrightarrow{P_i M_i}^2 = -\frac{K}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - a x_i - b)^2 \quad (10)$$

et qu'elle ne peut varier qu'avec les paramètres a et b , on obtient directement le système d'équations (4) après avoir calculé les dérivées partielles de U par rapport à « a » et à « b ». Ceci montre clairement l'analogie entre la méthode des moindres carrés et le principe du minimum d'énergie.

En conclusion, il est réconfortant de constater que l'on peut illustrer par une expérience simple un concept bien connu, mais néanmoins abstrait, comme celui des moindres carrés. Décidément les ressorts n'ont pas fini de faire parler d'eux !