Incertitudes et analyse de données

Statistique des incertitudes et inférence bayésienne appliquées à la mesure.

R. Legrand

10 juillet 2020

Table des matières

1 Incertitudes et mesures				
	1.1	esure en physique et dans l'industrie	8	
			ulaire	9
		1.2.1	Mesure, mesurage et mesurande	9
		1.2.2	Valeur vraie et Valeur de référence	10
		1.2.3	Incertitude et Erreur	10
	1.3	Consé	quences des incertitudes dans la mesure	10
		1.3.1	Caractériser l'aléatoire	12
	1.4	Théor	ème de la limite centrale	16
		1.4.1	Énoncé et lien avec la mesure physique	16
		1.4.2	Exemple	17
		1.4.3	Intervalle de confiance	18
		1.4.4	Conditions d'application du théorème de la limite centrale .	19
		1.4.5	Cas de variables non indépendantes	20
		1.4.6	Loi aléatoire sans écart type	21
		1.4.7	Mise en évidence expérimentale du théorème de la limite	
			centrale	22
	1.5	Loi de	e Student	26
	1.6	Incert	itudes et maximisation de l'entropie	26
		1.6.1	Loi normale	28
		1.6.2	Distribution exponentielle	28
	1.7	Quelq	ues remarques	28
2	Mo	dèles e	et régressions	30
	2.1	Régres	ssion linéaire : méthode des moindres carrés	31
		2.1.1	Présentation	31
		2.1.2	Incertitude constante suivant y	32
		2.1.3	Incertitudes suivant $y \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	32
	2.2	Param	nètres influençant les intervalles de confiance des coefficients a	
				33
		2.2.1	Estimateur de a	34

	2.2.2	Estimateur de b	35	
2.3	2.3 Valeurs aberrantes		35	
	2.3.1	Sensibilité aux données	35	
2.4	Limite	s de la méthode	36	
	2.4.1	Loi initiale non linéaire	37	
	2.4.2	Présence d'incertitudes suivant x et y	37	
	2.4.3	Incertitudes corrélées et changement de variable	37	
2.5	Condit		40	
2.6			40	
	2.6.1	-	40	
	2.6.2	Intervalle de confiance pour a et b	40	
2.7	Conclu	isions	41	
	Inférence bayésienne		42	
3.1		· ·	43	
	3.1.1		43	
		•	43	
	3.1.3	-	45	
3.2	Mesures et inférence bayésienne			
	3.2.1			
		*	47	
	3.2.2			
		incertitude	51	
3.3	Prise e	en compte de données a priori	55	
	3.3.1	Positionnement du problème	55	
	3.3.2	Fonction de vraisemblance	56	
	3.3.3	Choix du prior	56	
	3.3.4	Tracé de la probabilité <i>a prosteriori</i>	56	
	3.3.5	Code Python	57	
	3.3.5 3.3.6	Code Python	57 58	
Λnr	3.3.6	Conclusions	58	
	3.3.6 olicatio	Conclusions	58 60	
Apr 4.1	3.3.6 olicatio Analys	Conclusions	58 60 60	
	3.3.6 clicatio Analys 4.1.1	Conclusions	58 60 60 60	
	3.3.6 Colication Analys 4.1.1 4.1.2	Conclusions	58 60 60 60 61	
4.1	3.3.6 Analys 4.1.1 4.1.2 4.1.3	Conclusions ons de l'inférence bayésienne à l'analyse de données se statistique d'une panne de machine Présentation du problème Approche classique Approche bayésienne	58 60 60 60 61 62	
	3.3.6 Coloration Analysis 4.1.1 4.1.2 4.1.3 Problè	Conclusions ons de l'inférence bayésienne à l'analyse de données se statistique d'une panne de machine Présentation du problème Approche classique Approche bayésienne eme de la position du phare	58 60 60 60 61 62 63	
4.1	3.3.6 Collication Analys 4.1.1 4.1.2 4.1.3 Problè 4.2.1	Conclusions ons de l'inférence bayésienne à l'analyse de données se statistique d'une panne de machine Présentation du problème Approche classique Approche bayésienne ome de la position du phare Analyse du problème	58 60 60 60 61 62	
4.1	3.3.6 Coloration Analysis 4.1.1 4.1.2 4.1.3 Problè	Conclusions ons de l'inférence bayésienne à l'analyse de données se statistique d'une panne de machine Présentation du problème Approche classique Approche bayésienne eme de la position du phare	58 60 60 60 61 62 63	
	2.4 2.5 2.6 2.7 Infé 3.1	2.3.1 2.4 Limite 2.4.1 2.4.2 2.4.3 2.5 Condit 2.6 Métho 2.6.1 2.6.2 2.7 Conclu Inférence 3.1 Le thé 3.1.1 3.1.2 3.1.3 3.2 3.2.1 3.2.2 3.3 3.2 3.3 3.3 3.2 3.3 3.3	$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	

4.3	Modu	le EMCEE pour Python	70
	4.3.1	Retour sur le problème de la position du phare	70
4.4	Régres	ssion et élimination des données aberrantes	71
	4.4.1	Positionnement du problème	73
	4.4.2	Construction du modèle	74
	4.4.3	Paramètres de nuisance	77
	4.4.4	algorithme EMCEE	77
	4.4.5	Élimination des données aberrantes	78
4.5	Quelq	ues mots pour conclure	82

Table des figures

1.1	Représentations des incertitudes de mesure illustrée par flèches et cible	11
1.2	Représentation des incertitudes de mesure avec plusieurs mesurages	12
1.3	Exemple de loi normale	14
1.4	Distribution d'une moyenne de trois notes	18
1.5	Évolution de la distribution d'une moyenne	19
1.6	Évolution de l'écart type d'une moyenne de n tirages issus de pro-	
	cessus aléatoire	20
1.7	Évolution de l'écart type d'une moyenne de n tirages corrélés	21
1.8	Écart type de la moyenne de n tirages non corrélés issus de processus	
	aléatoire suivant une loi de Cauchy	22
1.9	Dispositifs expérimentales pour mise en évidence du théorème de la	
	limite centrale	23
1.10	Coefficients de Student donnés pour différents intervalles de confiance	
	$1-\alpha$ et un nombre de degré de liberté k. Pour un calcul de valeur	
	moyenne $k = N - 1$, avec N le nombre de points à disposition. La	
	dernière ligne correspond à un nombre infini de points de mesure et	
	donc au cas d'une loi normale continue	27
2.1	Exemple d'ajustement linéaire	32
2.2	Distribution statistique d'un coefficient déterminé par régression	
	linéaire : incertitudes constantes	33
2.3	Distribution statistique d'un coefficient déterminé par régression	
	linéaire : incertitudes non constantes	34
2.4	Distribution statistique d'un coefficient déterminé par régression	
	linéaire : influence d'une valeur aberrante	36
2.5	Distribution statistique d'un coefficient déterminé par régression	
	linéaire : influence du non respect des conditions d'application	39
3.1	Données brutes de l'activité d'un échantillon radioactif	48
3.2	Inférence bayésienne : activité d'un échantillon radioactif	51
3.3	Inférence bayésienne : détermination de deux paramètres	55
3.4	Influence du nombre de mesures et du prior sur le résultat final	59

4.1	Distribution exponentielle : modélisation d'un risque aléatoire de	
	panne	61
4.2	Illustration de la géométrie du problème de la détermination de la	
	position d'un phare	63
4.3	Distribution de Cauchy	64
4.4	Probabilité postérieure de la position α du phare	68
4.5	Probabilité postérieure des coordonnées α et β du phare	69
4.6	Probabilité postérieure déterminée au moyen de l'algorithme EMCEE	72
4.7	Données issues d'un tirage aléatoire : influence des données aber-	
	rantes sur la régression linéaire	74
4.8	Inférence des coefficients a et b ajustement d'un modèle affine	79
4.9	Ajustement d'un modèle affine par inférence bayésienne	81

Introduction

Ce document est initialement à destination des enseignants de BTS en mesures industrielles et a été rédigé en vu de préparer la réforme du BTS Métiers de la mesure. Il propose une initiation à l'évaluation des incertitudes expérimentales en sciences. La première partie consiste en une revue des notions classiquement abordées en classes de lycée et post-bac. Les autres parties seront centrées sur des études de cas. Les méthodes par inférences sont au centre des techniques et méthodes proposées dans ce cours.

J'ai choisi de ne pas développer l'aspect "mesure" pour me concentrer rapidement sur les implications d'une incertitude statistique relative à cette mesure. Avec grande modestie, je souhaite mettre à plat le fait que l'ensemble des usages associés aux opérations de mesure relève souvent du réflex et ces usages sont "transmis" aux élèves et étudiants avec la même intensité dogmatique que lorsque nous étions nous même étudiants. Nous sommes nous arrêté pour comprendre pourquoi après avoir acquis des données, nous en faisons la moyenne arithmétique? Et pourquoi ne retenons nous pas plutôt la valeur médiane ou n'importe quel autre estimateur? Comment et pourquoi éliminer des valeurs aberrantes, et surtout comment les caractériser?

L'objectif est de réaliser un tour des techniques statistiques employées pour tirer une valeur et une incertitude d'un ensemble de données. Ces notions statistiques sur lesquelles reposent nos calculs d'incertitudes sont loin d'être naïves et ne sont pas toutes abordables en cycle secondaire, ni même en cycle BTS. Ceci étant, les oublier complètement conduit à ne jamais se poser de questions quand à l'utilisation de ces outils.

Ce cours ne contient pas ¹ de notions sur la composition des incertitudes, la distinction entre incertitudes de type A et et de type B, ni même de techniques d'évaluation des incertitudes. Ce sont des sujets importants, et il existe de nombreuses ressources en ligne couvrant ces sujets.

Les chapitres 3 et 4 portent exclusivement sur l'approche par analyse bayésienne de l'analyse de données. Il s'agit d'une simple introduction, des ouvrages ou articles bien plus complets existent pour approfondir le sujet. Les ressources utilisées pour

^{1.} Pour le moment...

la rédaction de ce document sont citées en tête de chapitre.

L'ensemble des méthodes numériques sont réalisées avec Python 3. Ce document est distribuée sous **licence Creative Commons BY-NC-SA**.

Chapitre 1

Incertitudes et mesures

Ce premier chapitre propose une vue d'ensemble des techniques et méthodes utilisées dans les classes de lycée et formations post-bac techniques et scientifiques en sortie de lycée. Souvent présentées comme un ensemble de règles à appliquer, les fondements théoriques sont souvent négligés quand à l'évaluation des incertitudes d'une mesure. Pourtant, il est loin d'être systématique que les conditions d'application des méthodes enseignées soit réunies et cela conduit à une évaluation erronée des incertitudes de mesure.

Enfin, il permettra d'introduire le fait qu'une mesure et son analyse ne peuvent se passer d'éléments statistiques. Ces derniers sont le langage nécessaire et adéquat à la compréhension du processus de mesure et l'élaboration de son incertitude.

Références:

- VIM : Vocabulaire international de métrologie, BIPM
- GUM: guide pour l'expression de l'incertitude de mesure, BIPM
- Simple demonstration of the central limit theorem using mass measurements, K. K. Gan
- A simple demonstration of the central limit theorem by dropping balls onto a grid of pins, K. K. Gan
- Arrondissage des résultats de mesure, Nombre de chiffres significatifs, M.M. Bé, P. Blanchis, C. Dulieu
- Statistiques, IUT Biothechnologie, 2ème année, Université de La Rochelle, J-C. Breton

1.1 La mesure en physique et dans l'industrie

Les sciences physiques sont une science expérimentale. Elles reposent sur la méthode scientifique permettant la validation d'hypothèses à partir d'observations

expérimentales. Ces observations expérimentales nécessitent des mesures de grandeurs physiques qui sont alors connues avec un certain degrés d'incertitude. Nous verrons qu'il est nécessaire d'introduire un traitement statistique des données acquises. Ce dernier permet de circonscrire le domaine de connaissances, de certitudes associées aux mesures et au modèle.

Concernant le domaine industriel, seul l'aspect mesure de grandeurs physiques est mis en jeu dans le cadre de processus de fabrication, de contrôles, d'accord à une norme ou un cahier des charges par exemple. Mais le fond du problème reste identique : Comment quantifier ces incertitudes pour valider ou comparer les mesures réalisées?

1.2 Vocabulaire

Les notions recouvrants les concepts d'erreurs de mesures sont diverses et variés et peuvent être souvent source de confusion. Les organisations de métrologie, regroupées sous l'acronyme **ISO** ¹ ont publié un *Guide pour l'expression de l'incertitude de mesure* ainsi que le *VIM* : *Vocabulaire international de métrologie* afin de standardiser les usages.

Ces ouvrages utilisent et définissent une centaine de termes et acronymes. Voici quelques extraits du VIM :

1.2.1 Mesure, mesurage et mesurande

Le mot "mesure" a, dans la langue française courante, plusieurs significations. Aussi n'est-il pas employé seul dans le présent Vocabulaire. C'est également la raison pour laquelle le mot "mesurage" a été introduit pour qualifier l'action de mesurer. Le mot "mesure" intervient cependant à de nombreuses reprises pour former des termes de ce Vocabulaire, suivant en cela l'usage courant et sans ambiguïté. On peut citer, par exemple : instrument de mesure, appareil de mesure, unité de mesure, méthode de mesure. Cela ne signifie pas que l'utilisation du mot "mesurage" au lieu de "mesure" pour ces termes ne soit pas admissible si l'on y trouve quelque avantage. Extrait du VIM

- Mesurage, m : processus consistant à obtenir expérimentalement une ou plusieurs valeurs que l'on peut raisonnablement attribuer à une grandeur
- Mesurande, m : grandeur que l'on veut mesurer

^{1.} International Organization for Standardization

1.2.2 Valeur vraie et Valeur de référence

- Valeur vraie, f : valeur d'une grandeur compatible avec la définition de la grandeur
- Valeur de référence, f : valeur d'une grandeur servant de base de comparaison pour les valeurs de grandeurs de même nature

On notera le caractère prudent et pragmatique de la définition de la *Valeur vraie*. Dans les faits, il est impossible d'avoir accès à la valeur vraie d'une grandeur. En dehors des constantes fondamentales, pour lesquelles on considère qu'il n'existe qu'une seule valeur vraie, il est important de noter que les données acquises lors qu'un mesurage ne permettent que de définir des intervalles dans lesquelles il est raisonnable de penser que la valeur vraie se situe.

Cette notion sera rediscutée dans la partie traitant d'inférence et dans laquelle il ne sera plus question de trouver la valeur vraie, mais plutôt de définir la probabilité qu'une valeur soit vrai.

1.2.3 Incertitude et Erreur

- Incertitude de mesure, f : paramètre non négatif qui caractérise la dispersion des valeurs attribuées à un mesurande, à partir des informations utilisées
- Erreur de mesure, f : différence entre la valeur mesurée d'une grandeur et une valeur de référence

Il est à noter que ces définitions ne font pas référence à la **valeur vraie**. S'il n'existe pas de valeur de référence, il est difficile d'utiliser la notion d'erreur telle que définie dans le *VIM*. Il reste donc cette notion d'incertitude de mesure qui est une grandeur déterminée par analyse des données et permettant de définir un degré de confiance pour la valeur mesurée.

1.3 Conséquences des incertitudes dans la mesure

Les sources des incertitudes de mesure sont répertoriées dans les documents ISO consacrés aux incertitudes de mesure : conditions environnementales, biais humain, mesurande intrinsèquement aléatoire, etc.

L'ensemble de ces sources sont globalement à regrouper en deux catégories. Celles qui ont un effet systématique sur la mesure, celles qui ont un effet aléatoire.

• Les effets systématiques conduisent à un décalage constant de la valeur mesurée par rapport à la valeur théorique. Une fois identifiés, ces effets

- systématiques peuvent être simplement retranchés à la valeur mesurée. Toute la difficulté réside dans l'identification et l'évaluation de ces effets systématiques.
- Les effets aléatoires conduisent à une erreur aléatoire dispersée autour de la valeur vraie. Ces effets peuvent être liés à l'objet d'étude ² ou au processus de mesure ³. Dans les deux cas, il sera possible d'étudier les mesures avec une méthode statistique pour en tirer des informations utiles sur le mesurande.

Remarque didactique

Il est courant de voir les notions d'incertitude aléatoire et systématique représentées comme des flèches atteignant une cible donc le centre serait la *valeur vraie* (figure 1.1).

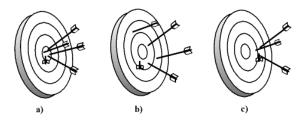


FIGURE 1.1 – Représentations des incertitudes de mesure classiquement présentées aux étudiants et illustrée par flèches et cible. Cette représentation a comme défaut majeur de mettre de côté le fait qu'en générale, l'expérimentateur n'a aucune idée de la position précise du centre de la cible.

La difficulté de cette représentation est qu'elle sous-entend une connaissance à priori de la valeur vraie et de ce fait, la qualité de la mesure est caractérisée à partir de cette connaissance. Dans les faits, il ne faut pas oublier que la valeur vraie n'est jamais connue et que cette valeur ne peut qu'être estimée à partir des données. La figure 1.2 représente, à mon sens, tout aussi schématiquement mais plus correctement la conception qu'il faut se faire d'une analyse de données. Sur cette figure, les données sont des points représentés par des couleurs différentes : trois jeux de données sont respectivement représentés en rouge, vert et bleu. La position moyenne de chaque jeu de donnée est utilisée comme centre d'un cercle dont le rayon est l'écart type.

- Les jeux de mesures vert et rouge présente la même dispersion, donc les mêmes incertitudes de mesure, mais ne sont pas centrées sur la même moyenne : mise en évidence d'une erreur systématique.
- 2. Par exemple, la taille d'individus dans une population.
- 3. Mesure de l'accélération de la pesanteur en un lieu précis.

- Les jeux de mesures rouge et bleu sont "inclus" l'un dans dans l'autre, ces deux mesures sont compatibles mais présente une dispersion, donc une incertitude aléatoire différente
- A partir de ces trois jeu de données, il est raisonnable de penser que seuls les mesures vertes présentent une erreur systématique par rapport à la valeur vraie.

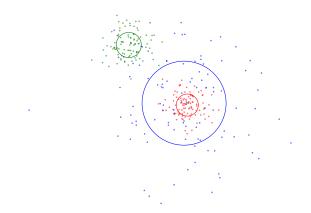


FIGURE 1.2 – Trois jeux de données constituant le mesurage d'un même mesurande sont représentés en rouge, bleu et vert. A chaque jeu de donnée, on associe un cercle dont le centre est la moyenne des points et le rayon représente la dispersion. Les données vertes et rouge ont sensiblement la dispersion, mais ne sont pas centrée sur la même valeur : il existe un effet systématique sur au moins l'un des deux mesurages. Le mesurage représenté en bleu est bien plus dispersée que les deux autre mesurages, mais est compatible avec le mesurage rouge.

1.3.1 Caractériser l'aléatoire

Distribution statistique et mesures

La dispersion des valeurs issues du mesurage forme une distribution statistique. Cette distribution est souvent modélisable par une loi de probabilité décrivant le caractère aléatoire d'une expérience.

La description de cette loi de probabilité se fait avec un nombre restreint de paramètres. En particulier, dans le cadre d'une mesure, valeur moyenne et de l'écart type de la loi de probabilité sont les deux paramètres permettant de caractériser principalement le résultat de la mesure. Ces deux grandeurs sont formellement définies par les relations suivantes : Pour un nombre N d'éléments contenus dans la distribution :

Espérance :
$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} x_i$$
 (1.1)

Écart type :
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i}^{N} (\mu - x_i)^2}$$
 (1.2)

Le nombre d'éléments contenu dans cette distribution statistique peut être infini si la grandeur physique mesurée est continue. Ainsi, en raisonnant sur l'ensemble des éléments accessibles au mesurage, il est possible de définir la moyenne et l'écart type d'une loi de probabilité f(x) par :

Espérance :
$$\mu = \int f(x)dx$$
 (1.3)

Écart type :
$$\sigma = \int f(x)(\mu - x)^2 dx$$
 (1.4)

Remarque : La variance est définie comme le carré de l'écart type $V = \sigma^2$. Les deux termes recouvrent des concepts similaires.

Ces distributions sont caractéristique du mesurage et du mesurande.

Loi Normale

Les lois normales jouent un rôle central. Elles sont parmi les loi de probabilité les plus adaptées pour modéliser les phénomènes naturels issus d'événements aléatoires. Elles prennent une place particulière car elles sont la limite de suites de tirages aléatoires indépendants et dont le comportement individuel ne suit pas forcément une loi normale (voir théorème de la limite centrale).

La loi normale représentée en figure 1.3 est définie par la distribution suivante :

$$\mathcal{N}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$
(1.5)

Il s'agit d'une courbe symétrique dont les valeurs les plus probables sont situées à quelques écarts types de la valeur moyenne. Pour la loi normale, on peut citer quelques intervalles de confiance :

- $P(\mu \sigma \le x \le \mu + \sigma) = 0.68$
- $P(\mu 2\sigma \le x \le \mu + 2\sigma) = 0.95$
- $P(\mu 3\sigma \le x \le \mu + 3\sigma) = 0.997$

Un mesurage réalisant cette distribution aura comme caractéristiques :

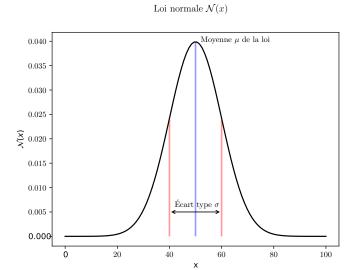


FIGURE 1.3 – Exemple de loi normale centrée sur $\mu=50$ et dont l'écart type $\sigma=10$.

- résultat du mesurage : espérance μ
- $\bullet\,$ incertitude de mesure caractérisée par l'écart type $\sigma\,$

Cela signifie qu'un mesurage aura 68% de chance de fournir une valeur située à une distance σ de l'espérance μ .

Construction d'estimateurs à partir de données

En réalité, il est impossible d'avoir accès à la loi de probabilité dans sont ensemble mais uniquement à une sous partie, à un échantillon réalisant la loi de probabilité : c'est l'objectif du mesurage, qui permet d'obtenir des données représentative de la distribution à laquelle obéit le mesurage en question.

A partir de ces données, le rôle des estimateurs est de fournir une *estimation*⁴ de l'espérance et de l'écart-type. Ces deux grandeurs sont représentatives de la valeur vraie d'une part et de l'incertitude associée au mesurage d'autre part.

Pour une loi statistique d'espérance μ et d'écart type σ et à partir d'un ensemble de données x_i de cardinal n, on définit les estimateurs suivants :

^{4.} Grandeur permettant d'évaluer un paramètre statistique inconnu à partir d'un échantillon. Divers paramètres caractérisent les estimateurs : convergence, biais, efficacité et robustesse. L'objectif de ce document n'est pas de refaire un cours démontré de statistique mais de donner des éléments permettant un approfondissement du sujet.

L'estimateur \overline{x} sans biais de l'espérance est la moyenne arithmétique :

$$\overline{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{1.6}$$

L'estimateur σ_{n-1} sans biais de l'écart-type lorsque l'espérance est inconnue :

$$\sigma_{n-1}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2$$
 (1.7)

Remarque : cet estimateur est aussi appelé "écart type expérimental", pour éviter la confusion il est conseillé d'utiliser le terme d'estimateur de l'écart type.

Dans le cas où l'espérance μ est connue, l'estimateur S de l'écart type est alors :

$$S^{2} = \frac{1}{n} \sum_{i}^{n} (x_{i} - \mu)^{2}$$
(1.8)

Cet estimateur est rarement utilisé dans le cadre d'une mesure physique puisque le but d'une mesure est de déterminer cette valeur moyenne qui sera ensuite assimilée à l'espérance qui est la valeur vraie du mesurage et de caractériser le tout par un écart type.

Intervalle de confiance

Si un mesurage x_i contenant n valeurs suit une loi statistique d'espérance μ et d'écart type σ alors, l'application du théorème de la limite centrale indique que la moyenne arithmétique \overline{x} suit une loi normale d'espérance μ et d'écart type $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$.

Il est classiquement conclu le résultat suivant concernant μ la valeur vraie de la mesure

$$\overline{x} = \mu \pm \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \tag{1.9}$$

Ce qui, en terme d'intervalle, correspond à la probabilité suivante pour une loi normale :

$$P(\mu - \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \le \overline{x} \le \mu + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}) = 68\%$$
 (1.10)

Cela signifie que statistiquement, la valeur moyenne des données à 68% de chance d'être située à $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ de l'espérance de la distribution, qui peut être assimilée à la valeur vraie recherchée.

Classiquement, un retournement de cette relation est réalisé pour déterminer l'intervalle de confiance. En assimilant \overline{x} à μ , on obtient l'intervalle de confiance suivant :

$$P(\overline{x} - \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \le \mu \le \overline{x} + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}) = 68\%$$
 (1.11)

Cet intervalle correspond à l'incertitude type u de la mesure :

$$u(x) = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \tag{1.12}$$

Remarque : Ces résultats ne sont utilisables que lorsque la variance de la valeur du mesurage est connue. Cette variance peut être éventuellement déterminée au travers d'un processus de composition des incertitudes.

Incertitude élargies U

L'incertitude élargie correspond à des intervalles de confiance défini pour une probabilité donnée que la valeur vraie du mesurande soit dans l'intervalle. Généralement, on définit un facteur d'élargissement k tel que l'incertitude élargie U=ku, avec u l'incertitude type.

Pour un mesurage suivant une loi normale, il est possible de définir les incertitudes élargies suivantes :

facteur d'élargissement k	niveau de confiance en %
1	68,3
2	95,5
3	99,7

Ces facteurs d'élargissement ne sont valables que dans le cas d'une loi normale. Usuellement en physique, la valeur moyenne est issue de processus de mesure dont il est possible de connaître les caractéristiques, et donc d'après le théorème de la limite centrale, la valeur moyenne tend vers une statistique suivant une loi normale. Cependant, cela n'est vrai que si le nombre de mesures est grand et si les conditions d'application du théorème de la limite centrale sont vérifiées.

1.4 Théorème de la limite centrale

1.4.1 Énoncé et lien avec la mesure physique

Ce théorème permet de connaître la statistique limite de la valeur moyenne de variables indépendantes possédant une espérance et un écart type borné. La valeur

moyenne tend vers une loi normale dont l'écart type est de la forme $\frac{\sigma}{\sqrt{n}}$.

Ce résultat est d'une importance fondamentale dans le domaine de la mesure. En effet, il permet de comprendre l'intérêt d'évaluer la valeur moyenne d'une série de données : cette valeur moyenne tend vers une valeur limite **et** l'incertitude associée à cette valeur moyenne décroit avec le nombre de mesures en $\frac{1}{\sqrt{n}}$.

1.4.2 Exemple

Imaginons qu'un étudiant reçoive une note comprise en 0 et 10. Bien que ce ne soit pas flatteur pour l'enseignant, cette probabilité est constante 5 sur l'ensemble des notes accessibles à l'étudiant. L'étudiant reçoit N notes.

Quelle loi statistique suit la valeur moyenne?

Pour répondre à ce problème, nous allons exploiter à notre avantage la possibilité d'utiliser des programmes informatiques capables "d'explorer" pour nous ce type de distribution. L'idée est de simuler l'existence de centaines de milliers d'étudiants recevant N notes dont nous allons calculer la valeur moyenne.

Le choix d'une distribution uniforme et continue de notes peut sembler éloigner de la réalité, mais les résultats sont identiques avec une distribution discrète et uniforme.

Pour N=3, nous allons tirer au sort 3 notes, puis en calculer la moyenne pour la stocker dans un tableau. Ensuite le processus recommence avec un nouveau jeu de note. Il est ainsi possible de s'intéresser à la statistique de la moyenne.

Pour N=3, le résultat obtenu est celui présenté en figure 1.4.

La distribution possède une forme de courbe en cloche, la valeur la plus probable est 5, sans surprise. La courbe représentée en noir est une loi normale de même valeur moyenne et de même écart type. La courbe obtenue, bien que proche, ne suit pas une loi normale. Outre quelques écarts, la différence majeur est que la loi normale autorise des valeurs allant à l'infini. Ici, c'est impossible dans la mesure où les notes et la valeur moyenne sont comprises entre 0 et 10.

Réaliser ce même travail pour différentes valeurs de N (figure 1.5 page 19). Pour N=1, nous retrouvons la distribution initiale uniforme sur l'intervalle [0, 10], aux fluctuations statistiques prés qui s'atténuent en augmentant le nombre de tirages.

Pour N=2, la distribution est triangulaire, avec un maximum de probabilité à 5. Pour $N\geq 3$, la forme générale s'arrondit et la courbe s'affine de plus en plus : son écart type se réduit. Pour chaque valeur de N, une courbe de loi normale de même moyenne et de même écart type est tracée. Très rapidement, la forme

^{5.} Il s'agit d'une distribution uniforme et continue sur l'intervalle [0,10]

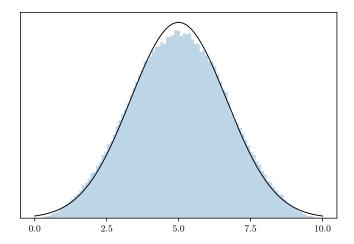


FIGURE 1.4 – Distribution d'une moyenne de trois notes comprises entre 0 et 10. Le tirage aléatoire est réalisé 300 000 fois, ce qui permet d'explorer la loi statistique issue du calcul de la moyenne.

générale tend vers celle d'une loi normale. Nous assistons à la convergence vers une loi normale comme indiquée par le théorème de la limite centrale.

Cette distribution est la distribution de Bates⁶, qui est obtenue en réalisant la moyenne d'une distribution uniforme.

1.4.3 Intervalle de confiance

Le théorème de la limite centrale stipule que l'écart type de la distribution statistique de la valeur moyenne tend vers $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$, où σ est l'écart type de la distribution initiale 7 .

Pour vérifier ce résultat, il suffit de réaliser un comptage pour connaître le ratio de moyennes qui sont situées à moins d'un écart type de la valeur centrale. Pour une loi normale, cela correspond à l'intervalle de confiance à 68%. Ces résultats sont donnés par la valeur P précisée sur la figure 1.5 page suivante. Très Rapidement, ce ratio et donc l'intervalle de confiance s'approche de la valeur théorique d'une loi normale.

6.
$$\sum_{k=0}^{n} -1^{k} C_{k}^{n} \left(\frac{x-a}{b-a} - k/n \right)^{n-1} \operatorname{sgn} \left(\frac{x-a}{b-a} - k/n \right)$$
7. Ici, pour une distribution uniforme :
$$\sigma = \frac{\operatorname{Valeur\ Maximum-Valeur\ minimum}}{\sqrt{12}}, \text{ soit ici } \frac{10}{\sqrt{12}} \approx 3,46$$

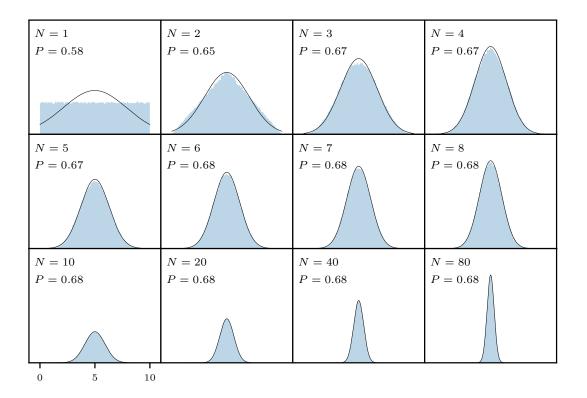


FIGURE 1.5 – Évolution de la distribution d'une moyenne de N notes comprises entre 0 et 10. Le tirage aléatoire est réalisé 300 000 fois, ce qui permet d'explorer la loi statistique issue de ce calcul de moyenne. P représente le ratio du nombre de moyennes comprise dans l'intervalle $\mu \pm \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$. On constate rapidement que P tend vers 0,68 qui est l'intervalle de confiance d'une loi normale.

1.4.4 Conditions d'application du théorème de la limite centrale

Les conditions d'application de ce théorème sont faibles. Dans sa formulation classique, il est demandé aux données issues du mesurage d'être non corrélées et de suivre une même statistique possédant un écart type constant et fini. Ces conditions sont très largement répandues et c'est ce qui explique la prédominance des lois normales pour décrire la plupart des phénomènes physiques ou naturelles.

D'autres formulations ⁸ ont des hypothèses encore plus faibles. Le théorème de la limite centrale continue d'être valable si les variables sont indépendantes et suivent une statistique d'écart type fini : il n'est pas obligatoire que les statistiques

^{8.} Condition de Liapounov ou condition de Lindeberg

ou même que les écart type soient identiques.

Enfin, dans le cas de variables faiblement corrélés, il est démontré ⁹ que la valeur moyenne continue de tendre vers des lois statistiques centrées et dont l'écart type décroit avec le nombre de données. Dans ce cas, l'incertitude sera d'autant plus réduite que le nombre de mesures sera important, mais les intervalles de confiance sont beaucoup plus difficiles à évaluer.

Le graphique 1.6 représente l'écart type de la valeur moyenne d'un tirage aléatoire suivant une loi normale d'écart type $\sigma=1$ en fonction du nombre de variables. Les variables sont indépendantes et l'écart type constant. L'écart type suit bien une évolution en $\frac{1}{\sqrt{n}}$ caractérisée par une droite de pente de $-\frac{1}{2}$.

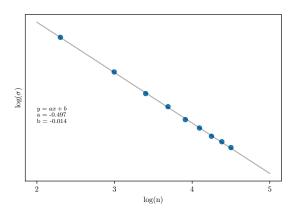


FIGURE 1.6 – Évolution de l'écart type d'une moyenne de n tirages issus de processus aléatoire suivant une loi normale d'écart type constant. Le graphique est en échelle \log/\log afin de mettre en évidence une droite de pente $-\frac{1}{2}$.

1.4.5 Cas de variables non indépendantes

Lorsque l'opération de mesurage à un effet sur les mesurages successifs, les données acquises ne sont plus indépendantes les unes des autres. Par exemple, lors d'une mesure électrique, l'auto-échauffement peut contribuer à modifier le résultat de mesures successives.

Dans ce cas, il est difficile de conclure quoi que ce soit. Dans la plupart des cas, la corrélation entre les mesures sera faible et une forme, même faible, du théorème de la limite centrale continuera de s'appliquer et il pourra être observé une réduction des incertitudes. Ceci étant, il n'est pas possible d'affirmer que les

^{9.} Influence of global correlations on central limite théoréms ans entropic extensivity, Marsh, Fuentes, Moyano, Tsallis

intervalles de confiance sont ceux définis par une loi normale, ni même de s'assurer une convergence en $\frac{1}{\sqrt{n}}$.

Le graphique 1.7 représente un teste similaire à la figure 1.6 page précédente, à ceci prés que les variables sont corrélés entre elle par la relation suivante :

$$x_{i+1} = \mathcal{N}\left(\overline{x}_{0\to i}, \sigma = 1\right) \tag{1.13}$$

La variable aléatoire i suit une loi normale d'écart type constant $\sigma=1$ et d'espérance $\overline{x}_{0\rightarrow i}$ la valeur moyenne de l'ensemble des tirages aléatoires précédents.

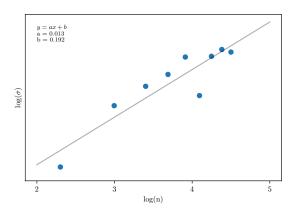


FIGURE 1.7 – Évolution de l'écart type d'une moyenne de n tirages corrélés issus de processus aléatoire suivant une loi normale d'écart type constant. Le graphique est en échelle logarithmique. L'écart type ne converge pas pour ce type de tirage aléatoire.

1.4.6 Loi aléatoire sans écart type

Il n'est pas possible de défini un écart type pour certaines distribution. En particulier, les lois suivant une statistique Lorentzienne encore appelé lois de Cauchy ne possède pas d'écart type et sont adaptés pour modéliser les raies d'émission en spectroscopie :

$$f(x, x_c, a) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{a^2}{(x - x_c)^2 + a^2}$$
 (1.14)

Le théorème de la limite centrale ne peut pas s'appliquer si ce type de bruit est présent lors du mesurage. Voir figure 1.8 page suivante

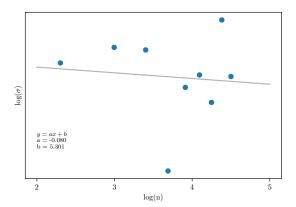


FIGURE 1.8 – Écart type de la moyenne de n tirages non corrélés issus de processus aléatoire suivant une loi de Cauchy de valeur centrale $x_c = 0$ et de facteur d'échelle a = 1. Le graphique est en échelle logarithmique. L'écart type ne converge pas pour ce type de tirage aléatoire.

1.4.7 Mise en évidence expérimentale du théorème de la limite centrale.

D'un point de vu didactique, il est intéressant de réaliser une démonstration expérimentale de ce théorème. La démonstration formelle nécessite une maitrise des notions d'intégration, de convergence de série par majorant. Elle n'est pas à portée d'étudiants en début de cycle et ne contribue pas à comprendre son mécanisme de fonctionnement.

L'objectif n'est pas de commenter en détails les dispositifs pédagogiques, mais de simplement lister quelques idées fonctionnant en phase de travaux pratiques avec les étudiants. Il est à garder en mémoire que la mise en évidence de ce théorème nécessite forcement un grand nombre de répétitions. Il est donc important de trouver des systèmes simples et rapides à mettre en place.

Pour assurer une convergence relativement rapide, il est important de respecter les conditions suivantes :

- les mesurages doivent être indépendants;
- les écart types doivent être relativement homogène.

Réalisation expérimentale

Mesurer la masse de 100 mL d'eau dans une éprouvette graduée de 400 mL.
 L'expérience est réalisée par deux étudiants, le premier remplissant l'éprouvette pendant que le second réalise la mesure de la masse. Un total de 30

mesures doit être réalisé;

- Mesure de la masse d'un plateau percé de 9 trous de rayons différents remplis de petites billes d'aciers.
- Planche de Galton ¹⁰
- Mesures de la valeur d'une résistance ¹¹

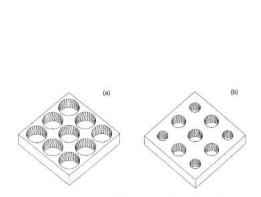


Fig. 1. Trays with nine holes of (a) same diameter (23 mm) and (b) different diameters (12 and 16 mm). The depth of the holes is 16 mm and the thickness of the trays is 19 mm.

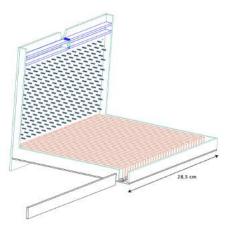


Figure 1. A schematic view of the apparatus for demonstrating the CLT. The vertical front cover and horizontal top cover have been removed for clarity. The notch at the top is for placement of the funnel.

FIGURE 1.9 – Dispositifs expérimentales pour mise en évidence du théorème de la limite centrale. Images réalisées par K. K. Gan.

Voir Simple demonstration of the central limit theorem using mass measurements and A simple demonstration of the central limit theorem by dropping balls onto a grid of pins, K. K. Gan.

Simulations numériques

Tirage discret:

Avec un tableur, il est relativement simple de réaliser la moyenne d'un tirage discret aléatoire et d'en répéter l'expérience un grand nombre de fois pour voir apparaître une loi normale.

Tirage continue:

Il est possible avec n'importe quel langage de programmation de réaliser une mise en évidence de ce théorème. Les tirages pseudo-aléatoires sont suffisamment pour reproduire l'aspect aléatoire d'une mesure. Le principe de l'algorithme est le suivant :

^{10.} Permet rapidement de mettre en évidence le théorème de la limite centrale

^{11.} Automatisable avec mesures réalisées par un multimètre ineffaçable avec ordinateur

- 1. Définir un nombre n qui sera le nombre de mesure réalisés. n peut être compris entre 10 et 100, la forme gaussienne de la loi normale est atteinte pour n = 10.
- 2. Définir un nombre p qui représente le nombre de répétitions des n tirages aléatoires. p doit être grand, au minimum 1000.
- 3. dans une boucle allant de 1 à p :
 - Réaliser n tirages aléatoires d'une variable $x: x_i$, i allant de 1 à n. La distribution utilisée pour ce tirage peut être quelconque tant qu'elle possède une valeur moyenne et un écart type défini. Une simple loi uniforme comprise entre 0 et 10 suffit.
 - Calculer la valeur moyenne des n tirages précédents : \overline{x}_j , j allant de 1 à p et stocker cette valeur dans un tableau à p entrées.
- 4. Réaliser un histogramme des valeurs de \bar{x}_p

La figure 1.5 page 19 a été réalisée pour différentes valeurs de n à partir d'une loi uniforme comprise entre 0 et 10.

Le code ci-dessous est une version python de l'algorithme suggéré.

```
Convergence vers la loi normale de la moyenne d'un tirage aléatoire
continue et uniforme
HHHH
#Modules
import numpy as np
from scipy import stats
import matplotlib.pyplot as plt
#Parametres
np.random.seed(8) #Pour la répétabilité du tirage aléatoire
P = 3000 # La moyenne est réalisée P fois
N = 5 # Nombres de mesure
#Partie principale du programme
#Réalisation de P moyennes de N tirages
x0 = (10*stats.uniform.rvs(0,1,N*P))
#Calcul de la moyenne suivant les N tirages
#X est un tableau contenant les P moyennes
X = np.mean(np.reshape(x0, [P,N]),1)
```

```
#Ajustement par une courbe gaussienne
G_fit = np.linspace(0, 10, 1000)
pdf = stats.norm(np.mean(X), np.std(X)).pdf(G_fit)

#Tracé graphique
plt.xticks([0,2.5,5,7.5,10])
plt.hist(X, bins=101, histtype="stepfilled", alpha=0.3, density=True)
plt.xlim([-0.5,10.5])
plt.plot(G_fit, pdf, '-k', lw = 1)
plt.text(0,np.max(pdf)/1.1,'Moyenne : {0:.2f}\nEcart type : {1:.2f}'
.format(np.mean(X),np.std(X)))
```

Comprendre le théorème de la limite centrale

C'est un résultat surprenant de voir surgir une distribution de valeurs de plus en plus piquées sur une valeur centrale alors que le tirage réalisé est uniforme. Il ne faut pas oublier que cette distribution n'est plus la distribution initiale. La variable étudiée est la valeur moyenne \overline{x} et non les x_i .

Ce résultat apparait intuitivement en raisonnant en terme de combinaisons. Prenons un tirage aléatoire et uniforme x_i d'une note entre 0 et 10 :

- La meilleur moyenne possible \overline{x} est la valeur 10. Cette moyenne est réalisée si tous les x_i obtenus valent 10. Il n'y a qu'une seule combinaison possible.
- La plus mauvaise moyenne possibles \overline{x} est la valeur 0. Cette moyenne est réalisée si tous les x_i obtenus valent 0. Il n'y a qu'une seule combinaison possible.
- La moyenne médiane de 5, quand à elle, est obtenue par un plus grand nombre de combinaison, rien qu'en prenant 2 notes : $\{0,10\}$, $\{1,9\}$, $\{2,8\}$, $\{3,7\}$... Cette moyenne peut être obtenues par un grand nombre de tirages différents.

Les deux premiers cas constituent les extrémités de la distribution, ils sont obtenus pour une combinaison unique de x_i . Intuitivement, il est facile de comprendre que cette réalisation est rare, beaucoup plus rare qu'une moyenne de 5 qui est réalisée par un grand nombre de combinaisons.

Le théorème de la limite centrale est donc un résultat combinatoire. Il est hautement plus probable d'avoir une moyenne proche du centre de la distribution car un grand nombre de tirages permette de la réaliser plutôt qu'une moyenne éloignée du centre de la distribution.

1.5 Loi de Student

Le théorème de la limite centrale permet de calculer l'incertitude associée à la moyenne d'un mesurage lorsque l'incertitude ou l'écart type du mesurage est connue. Ce n'est pas toujours le cas, et la loi de Student permet de déterminer un intervalle de confiance lorsque l'écart type est inconnu. Ce dernier est estimé par :

$$\sigma_{n-1}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2$$
 (1.15)

Les intervalles de confiance sont alors données par la relation :

$$\left[\overline{X} - t \frac{\sigma_{n-1}}{\sqrt{n}}; \overline{X} + t \frac{\sigma_{n-1}}{\sqrt{n}}\right]$$
 (1.16)

n est le nombre d'éléments que contient l'échantillon, et t est le coefficient de Student. Ce coefficient dépend à la fois de n et du niveau de confiance souhaité.

Exemple

Pour n = 10 avec un niveau de confiance de 95\% :

$$\left[\overline{X} - 2,26\frac{\sigma_{n-1}}{\sqrt{n}}; \overline{X} + 2,26\frac{\sigma_{n-1}}{\sqrt{n}}\right]$$
(1.17)

Cette relation est proche de celle donnée par une loi normale. Les facteurs d'élargissement sont simplement remplacés par les coefficients t donnés qui dépendent du nombre de mesures.

1.6 Incertitudes et maximisation de l'entropie

Il existe un lien fort entre le principe de maximisation de l'entropie au sens de Shanon en théorie de l'information, les distributions rencontrées jusqu'à présent et les mesures qu'elles sont censées décrire. Ce lien a été réalisé par Jaynes en 1957, et il stipule qu'il n'y a pas de différences entre l'entropie de Shanon et l'entropie définie en mécanique statistique ¹².

Un ensemble de données issues d'un mesurage définit un certain nombre de contraintes sur la distribution statistique sous-jacente. Par exemple, moyenne et écart type sont deux contraintes qui fixent certaines caractéristiques de la distribution. Il est possible d'en déduire tout un ensemble de distributions satisfaisant ces contraintes : loi uniforme, triangulaire, loi de Cauchy, loi normale etc.

^{12.} Voir le principe d'entropie maximale défini par E.T. Jaynes dans *Information Theory and Statistical Mechanics*, 1963

$1 - \alpha$	75%	95%	99%
k			
1	1,000	6,314	31,82
2	0,816	2,920	6,965
3	0,765	2,353	4,541
4	0,741	2,132	3,747
5	0,727	2,015	3,365
10	0,700	1,812	2,764
20	0,687	1,725	2,528
50	0,679	1,676	2,403
100	0,677	1,660	2,364
∞	0,674	1,645	2,326

FIGURE 1.10 – Coefficients de Student donnés pour différents intervalles de confiance $1-\alpha$ et un nombre de degré de liberté k. Pour un calcul de valeur moyenne k=N-1, avec N le nombre de points à disposition. La dernière ligne correspond à un nombre infini de points de mesure et donc au cas d'une loi normale continue.

Le principe d'entropie maximale stipule qu'il existe une distribution particulière maximisant l'entropie de Shanon, et donc minimisant les informations a priori conduisant à cette distribution. Il s'agit donc de la distribution ajoutant le moins d'informations et d'hypothèses à la mesure tout en tenant compte des contraintes fixées par cette dernière.

1.6.1 Loi normale

Connaissant l'espérance (valeur moyenne) et l'écart type d'une distribution, la loi normale est la distribution non bornée d'entropie maximale. Ce qui explique la prédominance de cette loi quand il s'agit de décrire une mesure physique.

Loi de Student

La loi de Student est une distribution définie à partir de la loi normale. En effet, si les variables aléatoires suivent une loi normale, alors connaissant l'espérance (valeur moyenne) et le nombre de degrés de liberté (lié au nombre de mesures), la loi de Student est la distribution d'entropie maximale. Ce qui explique son intérêt dans le domaine de la mesure où ce sont généralement deux informations connues et facile à déduire d'un ensemble de données expérimentales.

1.6.2 Distribution exponentielle

Sur le domaine $[0, \infty]$, pour une valeur moyenne fixé, la loi de décroissance exponentielle $\lambda e^{-\lambda t}$ est celle maximisant l'entropie. Ce qui explique qu'elle est adaptée pour la description de phénomène aléatoire comme la décroissance radioactive ou pour décrire des défaillances de système électronique ou mécanique.

En effet, ces derniers fixent les contraintes suivantes :

- l'événement se produit entre l'instant initiale et l'infini
- les temps mis pour que les événements se produisent ont une certaine valeur moyenne

De ce fait, la loi de décroissance radioactive peut être vue comme le principe de maximisation de l'entropie pour des événements respectant les contraintes précédentes.

1.7 Quelques remarques

Nous venons de voir que les outils statistiques reposent largement sur l'exploitation de la loi normale. Cette distribution a comme particularité d'être assez peu

informative ¹³, elle nécessite peu de connaissance quand à la forme de la distribution statistique des incertitudes de mesure.

Il est à souligner qu'il s'agit d'un choix, raisonnable, souvent non explicite, mais il s'agit avant tout d'un choix relevant d'un *a priori* sur la mesure : processus de mesurage donnant des valeurs non corrélées, existence d'un écart type et d'une moyenne.

D'une manière générale, cette analyse est mise de côté au nom d'une forme d'impartialité scientifique : il faudrait être capable d'aborder l'analyse de données sans aucun avis ou opinion sur ces dernières. Dans les faits, ce n'est jamais le cas, et dans une démarche classique, ces a priori existent et sont souvent occultés. Il suffit de se rappeler de toutes ces données éliminées car jugées aberrantes pour constater que cette conception de la science impartiale et aveugle quant aux données n'est pas complètement vrai et le propos mérite d'être nuancé.

Ce point sera développé dans le chapitre 3 page 42 sur l'inférence bayésienne qui présente l'avantage de rendre ces choix explicites.

^{13.} C'est même la moins informative possible, étant donné certaines contraintes.

Chapitre 2

Modèles et régressions

La régression est un ensemble de techniques consistant à déterminer les paramètres modélisant un phénomène à partir de données mesurées. La plus utilisée est la régression linéaire consistant à déterminer les coefficients d'un polynôme à partir de données présentant des incertitudes au moyen de relation d'algèbre linéaire.

Ce chapitre est consacré à l'ajustement d'un modèle polynôme de degrés 1 aux mesures dans le cadre de la régression linéaire. L'objectif est principalement de comprendre les hypothèses sous-jacentes à cette opération et donc les conditions d'applications et de validités.

Les notions développées dans ce chapitre sont issues des ressources suivantes :

- BUP 796 : Régression linéaire et incertitudes expérimentales, D. Beaufils, 1997
- arXiv 1008.4686, astrophysics: Data analysis recipes: fitting a model to data, D. W. Hoog, J. Bovy, D. Lang, 2010
- Économétrie Giraud et Chaix

L'objectif de ce chapitre est de prendre conscience des conditions extrêmement étroites d'application des techniques de régressions linéaires. Il est difficile de se rendre compte que l'utilisation de ces méthodes est souvent fausse puisque les résultats de mesures sont estimés avec une incertitude. Ainsi, il est facile de se convaincre que le résultat est "pertinent" puisqu'il n'est qu'à "un ou deux écart type" de la valeur théorique, et une analyse plus poussée est de ce fait souvent écartée.

2.1 Régression linéaire : méthode des moindres carrés

2.1.1 Présentation

L'objectif de cette opération est de déterminer les paramètres a coefficient directeur et b ordonnée à l'origine d'une droite qui soit la meilleur possible pour un ensemble de points (x_i, y_i) donnés présentant un bruit aléatoire.

$$\begin{cases} f(x) = ax + b \\ y_i = ax_i + b + \epsilon_i \end{cases}$$
(2.1)

Avec ϵ_i , le résidu du point, une erreur inconnue associée à chaque point i. La figure 2.1 représente graphiquement cette erreur pour chaque point de mesure par rapport à une loi linéaire initiale.

Cette procédure n'est pas arbitraire. "Meilleur possible" consiste à minimiser les écarts quadratiques verticaux entre les données et la droite moyenne :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - f(x_i) \right]^2 \tag{2.2}$$

Cette minimisation conduit à résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \chi^2}{\partial a} &= 0\\ \frac{\partial \chi^2}{\partial b} &= 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

Ce système possède les solutions suivantes :

$$\begin{cases} a = \frac{\sum (y_i - \overline{y}) (x_i - \overline{x})}{\sum (x_i - \overline{x})^2} \\ b = \overline{y} - a\overline{x} \end{cases}$$
 (2.4)

Réaliser un ajustement linéaire consiste, pour le logiciel de traitement de données, à calculer les coefficients précédents.

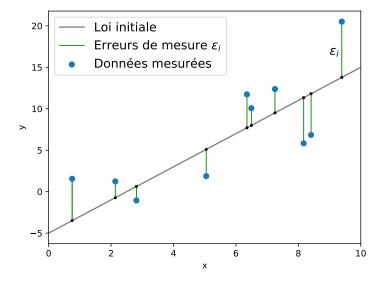


FIGURE 2.1 – Exemple d'ajustement linéaire d'un ensemble de points à une droite. Les traits verts représentent les résidus ou erreurs ϵ_i associés à chaque point.

2.1.2 Incertitude constante suivant y

Dans l'exemple suivant est présenté en figure 2.2. Nous générons un ensemble de données aléatoirement à partir d'une loi connue de type y = ax + b dite loi initiale. Une erreur suivant une loi normale d'écart type fixe est ensuite ajoutée à l'ensemble des données y pour reproduire un comportement aléatoire. Cette situation vérifie donc toutes les conditions d'application de la méthode des moindres carrés

La procédure numérique permet de calculer l'incertitude 1 sur les coefficients a et b.

2.1.3 Incertitudes suivant y

Les relations présentées dans la partie précédente suppose une incertitude constante suivant l'axe y. Dans les faits, cette hypothèse est rarement réalisée. Il est possible de reprendre l'analyse précédente en minimisant la somme des écarts

^{1.} Numériquement, les relations indiqués précédemment sont généralisées à n'importe quelle loi polynomiale et réécrite dans un formalisme d'algèbre linéaire. Calculer les coefficients a et b consiste donc à des calculs matriciels, facilement réalisés par un système informatique. L'incertitude apparait naturellement comme les coefficients de la matrice de covariance du système.

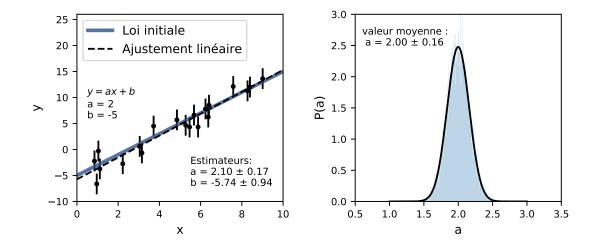


FIGURE 2.2 — Données générées aléatoirement avec un écart type constant. A gauche : exemple de régression linéaire et estimateurs associés. A droite : distribution complète du coefficient a.

quadratiques normalisés par l'écart type de chaque point.

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - f(x_i)\right]^2}{\sigma_{y_i}^2}$$
 (2.5)

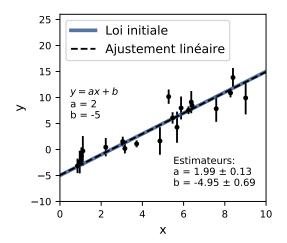
De même que précédemment, cette minimisation conduit à la détermination de l'ordonnée à l'origine b et la pente a de la régression linéaire.

Exemple

La figure 2.3 est un ajustement linéaire à partir de données construite de manière similaire au cas présenté en figure 2.2, à la différence de l'incertitude sur les données y qui ici n'est pas constante. La procédure des moindres carrés permet de prendre en compte des incertitudes différentes suivant l'axe y.

2.2 Paramètres influençant les intervalles de confiance des coefficients a et b

Le modèle de la régression linéaire permet d'obtenir des incertitudes sur les coefficients a et b. Ces incertitudes sont calculées analytiquement dans le cadre du modèle et doivent s'interpréter comme caractéristiques de la loi normale que suivent les coefficients a et b.



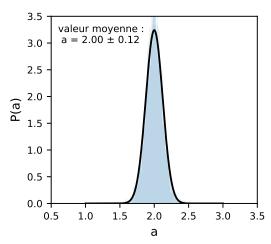


FIGURE 2.3 – Données générées aléatoirement avec un écart type aléatoire suivant une loi normale. A gauche : exemple de régression linéaire et estimateurs associés. A droite : distribution complète du coefficient a.

Généralement, ces coefficients sont négligés au profit des seuls valeurs a et b alors que l'évaluation des incertitudes occupent une place importante dans le raisonnement scientifique.

2.2.1 Estimateur de a

L'écart type de l'estimateur de a est :

$$\sigma_a = \frac{\sigma}{\sqrt{\sum (x_i - \overline{x})^2}} \tag{2.6}$$

où σ est l'écart type associé au mesure y_i .

- L'écart type σ des mesures influence directement les écart type σ_a . Réduire σ permet de réduire les incertitudes sur la pente.
- $\sum (x_i \overline{x})^2$ est un terme chiffrant l'écart total entre les points x_i et leur valeur moyenne. L'augmentation de ce dernier conduit à une diminution des incertitudes sur a. Ce denier peut être augmenter de deux manières :
 - en augmentant le nombre de points N;
 - en augmentant l'intervalle de prise de mesure x_i . Plus les points de mesure seront dispersés et éloignés les uns des autres, plus l'écart type σ_a sera faible.

2.2.2 Estimateur de b

L'écart type de l'estimateur de b est :

$$\sigma_b = \sigma \sqrt{\frac{1}{N} + \frac{\overline{x}^2}{\sum (x_i - \overline{x})^2}}$$
 (2.7)

où σ est l'écart type associé au mesure y_i et N le nombre de points.

- L'écart type σ des mesures influence directement les écart type σ_b . Réduire σ permet de réduire les incertitudes sur l'ordonnée à l'origine;
- $\frac{\overline{x}^2}{\sum (x_i \overline{x})^2}$ est un terme chiffrant la dispersion des valeurs de x_i et l'éloignement à l'ordonnée à l'origine. Pour réduire σ_b , il conviendra de :
 - prendre des points x_i proche de l'ordonnée à l'origine pour réduire le terme x_i ;
 - augmenter l'intervalle de mesure des x_i ainsi que le nombre de points n qui agit sur le terme en $\frac{1}{n}$

2.3 Valeurs aberrantes

2.3.1 Sensibilité aux données

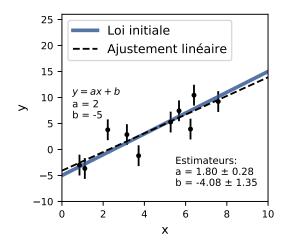
La faiblesse de la méthode des moindres carrés réside dans le fait qu'elle donne trop de poids à des données aberrantes par rapport à l'ensemble des données. Cela signifie qu'un faible nombre de valeurs aberrantes peut conduire à une variation significative du résultat final.

La figure 2.4 représente une telle situation. L'ensemble des données est généré similairement à celles présentées en figure 2.2. Un point est choisi au hasard pour jouer le rôle d'une valeur aberrante. Ce dernier se voit attribuer une valeur aléatoire centrée sur la moyenne des valeurs y et d'écart type constant mais élevé.

L'ajustement linéaire réalisé sur un jeu de donnée tiré au hasard est moins bon, mais est toujours compatible avec avec la loi initiale. Cependant, la statistique complète ne suit plus une loi normale et les intervalles de confiance ne sont plus valide.

Élimination des valeurs aberrantes

Une stratégie classique consiste à éliminer les données aberrantes. Ce processus d'élimination est fréquent, mais introduit des difficultés quand à la validité de la mesure en elle-même puisque ce processus est souvent à l'appréciation de la



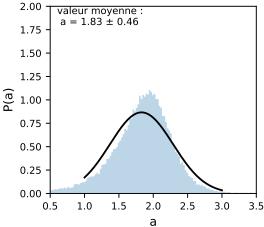


FIGURE 2.4 – Ajustement linéaire d'une relation affine. Les données ont été générées avec avec un bruit aléatoire constant. Un point au hasard n'est pas corrélé aux autres et joue le rôle d'une valeur aberrante. La distribution des valeur de a ne suit plus une loi normale et n'est plus symétrique. La valeur moyenne de a et l'écart type sont très éloignés des estimateurs. Il est à remarquer que la valeur la plus probable reste néanmoins égale à la valeur théorique du coefficient a.

personne responsable de la mesure ou du traitement de données. Il existe des procédures d'élimination des données aberrantes, par exemple :

- critère de Chauvenet;
- critère de Peirce;
- test de Grubb's.

Ces méthodes fournissent un procédé objectif et quantitatif pour l'élimination des données aberrantes, néanmoins cela ne les rends pas forcément scientifiquement et méthodologiquement correcte, en particulier dans les échantillons à faible population.

2.4 Limites de la méthode

Lors d'études de données, certains usages courants ne satisfont pas les conditions d'application strict de la régression linéaire :

- données aberrantes;
- loi non conforme au modèle : présence d'une non linéarité dans les données et modélisation par une loi affine ;

- incertitude suivant X et Y;
- corrélation entre incertitudes et données

Les sous-parties suivantes présentent des exemples associés à la statistique complète du coefficient a comme illustration de la déviation au modèle gaussien centré sur la valeur théorique de a. Ces déviations, bien que généralement faible, font qu'il est plus difficile de conclure sur la valeur finale et sur les incertitudes associées aux coefficients.

2.4.1 Loi initiale non linéaire

Le choix du modèle influe grandement sur les résultats de ce type de méthode. En figure 2.5(a), la loi initiale n'est pas parfaitement linéaire, un terme quadratique de faible amplitude est ajouté à la loi initiale. Ceci a pour conséquence d'éloigner les valeurs des coefficients calculés par la méthode des moindres carrés. En figure 2.5(a), la recherche d'une valeur a=2 conduit à une statistique d'allure gausienne centrée sur $a=1,80\pm0,16$.

2.4.2 Présence d'incertitudes suivant x et y

Le modèle de la régression linéaire demande une incertitude suivant x négligeable devant l'incertitude suivant y. La figure 2.5(b) présente un exemple de régression réalisée avec une incertitude de même ordre de grandeur suivant les deux axes. De même que précédemment, la recherche d'une valeur a=2 conduit à une statistique d'allure gausienne centrée sur $a=1,80\pm0,21$.

2.4.3 Incertitudes corrélées et changement de variable

Les incertitudes ne doivent pas être corrélées aux données x et y pour pouvoir utiliser le modèle de la régression linéaire. Cette situation est fréquemment rencontrée expérimentalement : n'importe quelle mesure au multimètre possède une incertitude dépendant de la valeur lue.

Les changements de variables introduisent aussi une corrélation de ce type. Pour simplifier les analyses, il est courant de pratiquer un changement de variable pour se ramener à une relation linéaire. Cette pratique est aussi liée au fait que souvent, les logiciels utilisés pour réaliser les analyses de données ont peu d'options en terme de régression linéaire et souvent, seul un modèle affine est proposé.

Prenons le cas de la période T d'un pendule de longueur l, à partir de laquelle il est extrait l'accélération de la pesanteur g.

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \tag{2.8}$$

Le changement de variable classiquement introduit est $\theta=T^2=\frac{4\pi^2}{g}l$. Ainsi l'étude de $\theta=f(l)$ conduit à une relation affine dont le coefficient directeur permet une évaluation de g.

La difficulté est que l'incertitude associée à la variable θ est corrélée à T, en effet :

$$\sigma(\theta) = 2T\sigma(T) \tag{2.9}$$

Ainsi, même si l'incertitude suivant T est constante, ce n'est pas le cas de θ . La plupart des changement de variable conduisent à cette situation.

La figure 2.5(c) présente un exemple de régression réalisée avec une incertitude corrélée à la valeur y. La recherche d'une valeur a=2 conduit à une statistique centrée sur $a=1,72\pm0,21$ dont l'allure n'est plus gausienne.

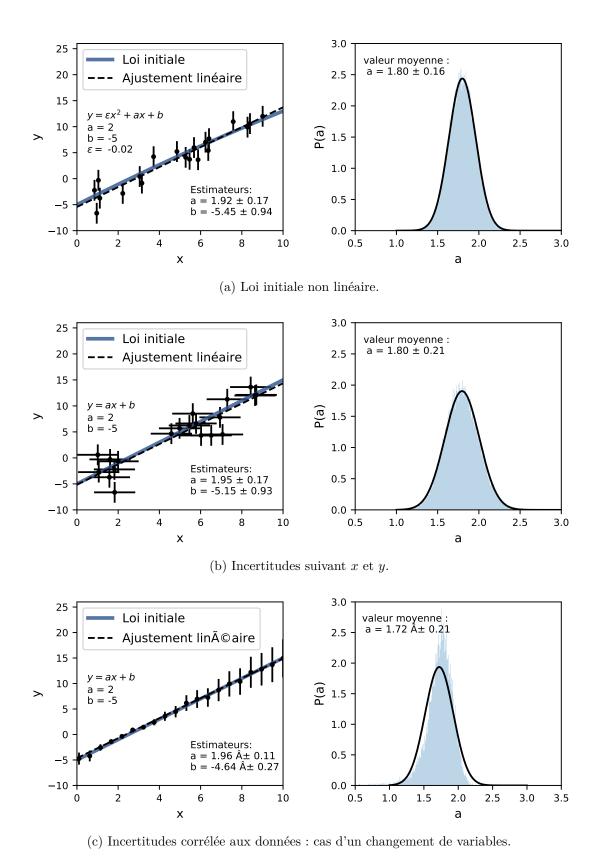


FIGURE 2.5 – Illustration de régression hors conditions strictes d'application. Les données sont générées aléatoirement avec un écart type non aléatoire. A gauche : exemple de régression linéaire et estimateurs associés. A droite : distribution complète du coefficient a.

2.5 Conditions d'applications de la méthode des moindres carrés

Dans les parties précédentes, il a été mis en évidence le fait que les conditions d'application de la méthode des moindres carrés sont strictes et un non respect de ces dernières conduit rapidement à une estimation erronée des paramètres du modèle ainsi que leurs incertitudes.

La méthode des moindres carrés repose sur les hypothèses suivantes :

- La loi physique sous-jacente aux données est connue;
- L'incertitude suit une loi Normale uniquement suivant y_i et non corrélée aux y_i ;
- Absence de points aberrants

Dans les faits, les conditions d'applications ne permettent souvent pas l'utilisation de cette méthode, mais dans un contexte scolaire, elles sont largement utilisées, faute de mieux. La grande difficulté étant qu'en dehors des conditions d'application strictes de cette méthode, il n'existe pas de consensus net permettant de réaliser l'ajustement des données par une loi connue de manière simple.

2.6 Méthode de régression lorsque l'incertitude sur les données est inconnue

2.6.1 Estimateur de l'incertitude σ_{ϵ}

Un estimateur sans biais de l'écart type de l'incertitude est :

$$\sigma_{\epsilon} = \frac{\sum \epsilon_i^2}{N - 2} \tag{2.10}$$

Avec ϵ_i les résidus définis dans la relation 2.1.

2.6.2 Intervalle de confiance pour a et b

Lorsque l'incertitude est estimée à partir des résidus, les facteurs d'élargissement à prendre en compte pour les intervalles de confiance ne sont plus ceux de la loi normale, mais ceux d'une loi de Student à N-2 degrés de liberté, les écarts types σ_a et σ_b sont identiques à ceux définis par les relations 2.6 et 2.7.

2.7 Conclusions

Le traitement et la manipulation de données occupent une place fondamentale dans une démarche scientifique. Plus largement, l'utilisation d'outils statistiques est de plus en plus répandue car fortement démocratisés avec l'utilisation de tableurs dans des champs professionnels divers et variés. Ces outils grand public reposent tous sur le modèle de la régression linéaire dont les conditions d'utilisation sont assez strictes. De ce fait, il est important d'avoir des notions relatives à l'utilisation de cet outils et avoir conscience de leurs limites.

Concernant une utilisation pédagogique, il est important de ne pas négliger l'évaluation des incertitudes associées aux coefficients issues de la régression linéaire. Ces derniers sont simples à obtenir et si les conditions d'applications sont vérifiés, ils informent correctement sur l'incertitude des résultats.

Chapitre 3

Inférence bayésienne

L'inférence est un procédé permettant d'*induire* les caractéristiques générales d'une statistique à partir d'un échantillon. Ce procédé permet de calculer des estimateurs tout en évaluant le niveau de confiance de ces derniers.

L'ensemble des techniques présentés dans les chapitres 1 et 2 sont des techniques d'inférences statistiques.

L'objectif de ce chapitre est d'introduire le concept d'inférence bayésienne. Cette technique d'inférence nécessite de renverser certains *a priori* relatifs à la mesure et au traitement de données. Ce changement de paradigme sera expliqué dans la première partie de ce chapitre.

La suite de ce chapitre sera consacrée à des études de cas permettant de mettre en lumière les techniques d'inférence bayésienne.

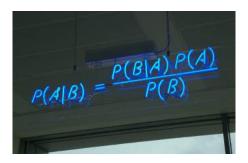
Références:

- Frequentism and Bayesianism : A Python-drivenPrimer J.VanderPla
- Data Analysis Recipes : Using Markov Chain Monte Carlo D.W. Hogg, D. Foreman-Mackey
- emcee Documentation D. Foreman-Mackey
- It is Time to Stop Teaching Frequentism to Non-statisticians W. M. Briggs
- Bayesian Reasoning in Data Analysis G. D'Agostini
- A Gentle Introduction to Bayesian Analysis: Applications to Developmental Research R. van de Shoot, D. Kaplan, J. Denissen, J.B. Asendorpf, F.J. Neyer, M.A.G. van Aken
- Infolrxiation Theory and Statistical Mechanics E. T. Jaynes
- Note de cours Statistique Bayésiennes, J. Rousseau, ParisTech
- Bayes Theorem, G. Sanderson

- Bayésianisme versus fréquentisme en inférence statistique, J. Sprenger
- BAYESIAN INDUCTIVE INFERENCE AND MAXIMUM ENTROPY S.F. Gull
- Bayesian reasoning in data analysis, a critical introduction G.D. Agostini

3.1 Le théorème de Bayes

3.1.1 Introduction



Le théorème de Bayes permet l'estimation de probabilités. Il est utilisé dans des domaines variés comme l'intelligence artificielle en lien avec des algorithme de prise de décisions, dans les secteurs financiers pour les calculs de risques ou encore en sciences pour induire des informations concernant des hypothèses moyennant la connaissance de certaines données issues de mesures.

C'est un résultat de base en statistique permettant de manipuler des probabilités conditionnels.

3.1.2 Quand utiliser ce théorème

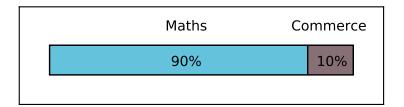
Un premier cas

Voyons en détail un exemple d'application de ce théorème.

Sur le campus d'une université, vous observez un groupe d'étudiants appeler un de leur camarade pour qu'il les rejoigne "Steve, par ici!". Steve, la démarche maladroite, chemise froissée et mal rangée, cheveux en batailles, les rejoint timidement. Vous l'observez dans sa course. Des lunettes rondes et repositionnées à la hâte barre son visage. Il porte une sacoche mal fermée entre ses bras.

Est-il plus probable qu'il s'agisse d'un doctorant en mathématiques fondamentales ou d'un étudiant d'école de commerce?

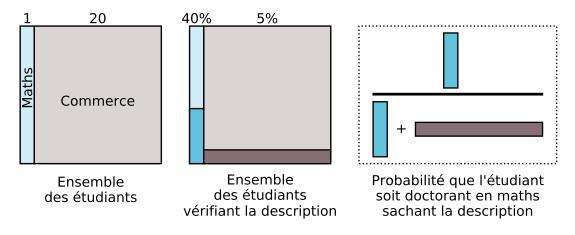
La première réponse qu'il vient à l'esprit est qu'il s'agit vraisemblablement d'un étudiant en mathématiques. Cela semble raisonnable dans la mesure où la description colle à la représentation qu'il est possible de se faire de ce type d'étudiant. En étant honnête, la réponse va beaucoup dépendre des représentations et conception que l'on a de ces deux disciplines. Néanmoins, une étude similaire a été conduite par D. Kahneman et A. Tversky concernant le discernement et la prise de décision, l'énoncé diffère, mais l'esprit est identique. Les résultats de cette étude indique que les personnes interrogées pensent qu'il est hautement plus probable que Steve soit un étudiant en mathématique.



Ce point de vu est largement biaisé par les représentations, les préjugés concernant les étudiants en mathématiques et en école de commerce. Et pour répondre correctement à cette questions, il faut inclure des informations concernant le ratio doctorant en mathématiques / étudiant en école de commerce. C'est ce que permet le théorème de Bayes.

La mécanique du théorème de Bayes

Les données présentés dans ce paragraphe ne sont pas exactes mais cela n'a pas d'importance sur le raisonnement. Prenons un ratio de 1 doctorant en mathématique pour 20 étudiants en école de commerce. Ce ratio est représenté sous forme d'air coloré dans la figure suivante :



Si nous devions mettre quelques chiffres, il n'est pas complètement absurde de dire que peut-être 40% des doctorants en mathématiques fondamentales peuvent répondre à la description précédente alors que peut-être 5% des étudiants en école vérifieraient cette description.

La probabilité de rencontrer un doctorant en maths vérifiant la description est donc :

$$p = \frac{\text{doctorants en maths v\'erifiant la description}}{\text{Total des \'etudiants v\'erifiant la description}} = \frac{0.4 \times 1}{0.4 \times 1 + 0.05 \times 20} = 0.28$$

Ainsi, il est quand même moins probable de rencontrer un doctorant en mathématiques fondamentales qu'un étudiant en école de commerce ayant la description précédente.

3.1.3 Vers un formalisme adapté à la mesure

Les opérations que permettent ce formalisme sont les suivantes :

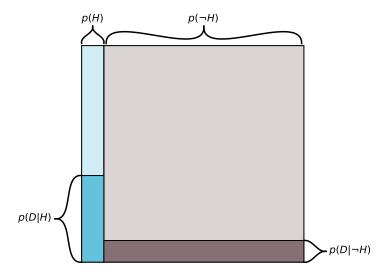
- 1. Nous cherchons à vérifier une hypothèse **H**, pour notre exemple, il s'agirait de { H : Steve est doctorant en mathématiques }.
- 2. Des mesures sont réalisés en lien avec cette hypothèse, ici il s'agit d'un ensemble d'observations décrivant Steve. Il s'agit d'un ensemble de données notées ${\bf D}$ pour datas.
- 3. Nous voulons connaître la probabilité que l'hypothèse \mathbf{H} soit vrai sachant que nous connaissons des données \mathbf{D} .

Cette dernière probabilité est une probabilité conditionnelle noté : $p(\mathbf{H}|\mathbf{D})$.

En reprenant l'analyse précédente, pour calculer cette probabilité, nous avons utilisé les termes suivant :

- $p(\mathbf{H})$: la probabilité que l'hypothèse soit vraie. Il s'agit de la proportion de doctorant en mathématiques.
- $p(\mathbf{D}|\mathbf{H})$: la probabilité d'obtenir les données si l'hypothèse est vérifiée. Il s'agit de la proportion de doctorant en mathématiques vérifiant la description.
- $p(\mathbf{D})$: la probabilité d'avoir les données. Il s'agit de la proportion d'individus vérifiant la description parmi les doctorants en mathématiques et étudiant en école de commerce 1 .

^{1.} Précédemment, cette probabilité a été exprimé sous la forme de la somme de deux termes : $p(\mathbf{D}) = p(\mathbf{D}|\mathbf{H}) + p(\mathbf{D}|\neg\mathbf{H})$.



Le théorème de Bayes s'écrit ainsi de la façon suivante :

$$p(\mathbf{H}|\mathbf{D}) = \frac{p(\mathbf{D}|\mathbf{H}) \cdot p(\mathbf{H})}{p(\mathbf{D})}$$
(3.2)

Définitions

- **H** est l'hypothèse pour laquelle un niveau de crédibilité est inférée. Dans le cadre d'une mesure, il s'agit d'un modèle associé à des paramètres θ_i qui permettent de définir des *intervalles de crédibilité*.
- $p(\mathbf{H}|\mathbf{D})$ est la **plausibilité** ou probabilité **postérieur** d'une hypothèse \mathbf{H} . Elle est calculée en tenant compte du processus de mesure \mathbf{D} . Il s'agit d'un degrés de confiance a postériori prenant en compte toutes les informations à dispositions : données et connaissances *a priori*. Il permet de quantifier la *crédibilité* d'une hypothèse.
- p(D|H) est la fonction de vraisemblance des données D vis à vis de l'hypothèse H. Cette fonction décrit la plausibilité des données D vis à vis d'une hypothèse H dans le cadre d'une réalisation aléatoire de ces données D.
- $p(\mathbf{H})$ est la probabilité *a priori* qui précède toute mesures. Il peut s'agir d'une conviction estimée par l'opérateur ou des données antérieurs à la mesure et intégrées par ce biais dans le processus d'inférence.
- $p(\mathbf{D})$ agit comme une normalisation ou une fonction de partition en physique statistique. Nous verrons par la suite qu'il ne sera pas forcément

utile de la prendre en compte et est souvent difficile à obtenir ².

Le schéma de fonctionnement de ce formalisme est le suivant :

Distribution $a \ priori + Données \longrightarrow Distribution <math>a \ posteriori$

3.2 Mesures et inférence bayésienne

Il est à noter que le formalisme présenté permet de calculer la probabilité ou le niveau de crédibilité d'une hypothèse moyennant la connaissance de données. Ces probabilité se présentent sous la forme de distribution pour les paramètres de l'hypothèse ou du modèle considéré. Habituellement, dans un positionnement statistique classique, c'est l'inverse qui est recherché : quelle probabilité ont les données d'être vrai sachant l'hypothèse qui est supposée vrai. De là et à partir de ces intervalles de confiance, un seuil de rejet est défini pour affirmer ou infirmer l'hypothèse choisie ³.

Dans le formalisme bayésien, les données sont considérés comme vraies ou certaines ⁴. Au moyen de la relation de Bayes, une distribution, la *vraisemblance* d'une hypothèse, est inférée. À partir de cette vraisemblance, des *intervalles de crédibilités* sont définis pour les paramètres de l'hypothèse.

3.2.1 Premier cas d'analyse de données en formalisme bayésien : détermination d'un paramètre

Cette exemple est inspiré de la documentation en ligne du module Python emcee dédié à l'analyse de données par statistique bayésienne. Il s'agit d'une série de mesure de l'activité d'un échantillon radioactif. Cette activité A_0 est constante dans le temps. Nous réalisons une série de n mesures : $D = \{A_i, e_i\}$

Génération des données

Le bloque de code suivant permet de générer les données :

```
""" Création d'une série de données pour l'activité radioactive d'un échantillon """ import numpy as np from scipy import stats
# Les données sont aléatoires mais fixées avec ce paramètre
```

- 2. analytiquement et numériquement
- 3. Voir hypothèse nulle et facteur ou valeur p
- 4. Après tout, ce sont des faits expérimentaux.

```
np.random.seed(123) # Pour la répétabilité
```

```
AO = 1000 # Valeur de référence de l'activité radioactive

N = 50 # Nombre de mesures

A = stats.poisson(AO).rvs(N) # Réalisation des N mesures

ei = np.sqrt(A) # écart type estimé pour une loi de Poisson
```

Les données sont générées avec une loi de Poisson et sont représentées à la figure 3.3. Cette dernière est pertinente pour décrire un comptage d'événements se produisant dans un intervalle de temps donné avec une fréquence moyenne connue et indépendant du temps. Ici, la dispersion statistique est supposée être uniquement due aux processus de mesure.

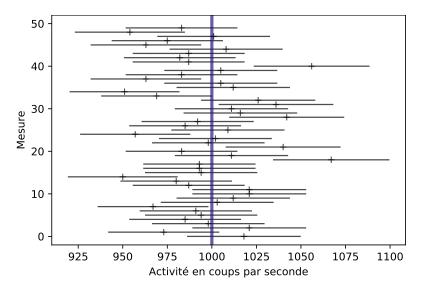


FIGURE 3.1 – Données brutes de l'activité d'un échantillon radioactif $D = \{A_i, e_i\}$. La barre centrale représente la valeur de référence. Une dispersion autour de la valeur de référence est observée.

Approche classique

Une fois les données acquises, le travail d'analyse consiste à répondre à la question suivante : Quelle est la meilleur estimation de l'activité réelle de l'échantillon. L'approche statistique classique, détaillée dans les premiers chapitres, indique que le meilleur estimateur est la valeur moyenne empirique :

$$A_0 = 1000 \, \mathrm{s}^{-1}$$

$$A_{\mathrm{estim\acute{e}e}} = \frac{1}{n} \sum A_i = 997 \pm 4 \, \mathrm{s}^{-1}$$

Ainsi, la valeur estimée est compatible avec la valeur de référence pour 50 mesures.

Approche bayésienne

Maintenant, nous voulons calculer la probabilité de l'activité connaissant les mesures : p(A|D) en utilisant le théorème de Bayes.

$$p(A|D) = \frac{p(D|A) \cdot p(A)}{p(D)} \tag{3.3}$$

- $p(A) \propto 1$ la probabilité *a priori* est choisie uniforme et proportionnel à 1, il s'agit un d'un *prior* non informatif.
- $p(D|A) \propto \mathcal{L}(D|A)$ est la fonction de vraisemblance.

Cette fonction de vraisemblance est construite de façon à chiffrer la probabilité qu'une donnée D_i soit vraie pour une activité A réelle. Supposons une erreur de forme gausienne :

$$p(D_i|A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi e_i^2}} e^{\left[-\frac{(A_i - A)^2}{2e_i^2}\right]}$$
(3.4)

La fonction de vraisemblance est construite de la manière suivante :

$$\mathcal{L}(D|A) = \prod_{i=1}^{N} p(D_i|A)$$
(3.5)

En effet, les mesures étant indépendantes, la probabilité totale d'avoir ce jeu de données est simplement le produit des probabilités de chacune des données.

En combinant ces résultats avec l'équation 3.3 :

$$p(A|D) \propto \mathcal{L}(D|A)$$
 (3.6)

La distribution postérieur est simplement proportionnelle à la fonction de vraisemblance \mathcal{L} . Il n'est pas utile de calculer tous les termes du théorème de Bayes. Le terme p(D) est une normalisation qui est indépendante des paramètres de l'hypothèse, il n'apporte rien à l'analyse de données.

```
# Definition logarithmique des probabilités
def log_prior(theta):
    return 1 # prior non informatif

def log_likelihood(theta, Ai, ei):
    return -0.5 * np.sum(np.log(2 * np.pi * ei ** 2)
```

```
+ (Ai - theta) ** 2 / ei ** 2)

def log_posterior(theta, Ai, ei):
    return log_prior(theta) + log_likelihood(theta, Ai, ei)
```

Les probabilités utiles sont définis par leur logarithmique car il est plus simple de réaliser une somme qu'un produit numériquement.

```
# Calcul la probabilité a posteriori p
A = np.linspace(975, 1020, num = 500) #Paramètre du modéle
logp=[] #initialisation du logp

for Avar in A:
    logp.append(log_posterior(Avar, Ai, ei))

# Normalisation à l'unité de p
from scipy.integrate import simps
p = np.exp(logp)
p /=simps(p,A)

# Tracé de la probabilité postérieure
fig, ax = plt.subplots()
plt.plot(A,p)
plt.xlabel("Activité en coups par seconde")
plt.ylabel("p(A|D)")
```

Nous obtenons un ensemble de distribution de probabilité concernant le paramètre A du modèle. L'hypothèse la plus probable et son intervalle de crédibilité sont identiques à la valeur moyenne et à l'intervalle de confiance calculés avec des technique statistique classique.

$$A_0 = 1000 \,\mathrm{s}^{-1}$$

$$A_{\rm crédible} = 997 \pm 4 \,\mathrm{s}^{-1}$$

L'inférence bayésienne est plus complexe à mettre en œuvre, et fournit un résultat rigoureusement identique à l'inférence classique. L'enjeu réside dans le positionnement de ce dernier et surtout dans l'universalité de la méthode. La partie suivante propose une extension de l'étude réalisé ci-dessus et le code algorithmique mis en place sera à peine modifié pour répondre à un problème bien plus complexe.

Concernant la procédure numérique, la probabilité postérieure est facile à déterminer par calcul direct. Ce n'est plus le cas quand le modèle possède beaucoup de variable. Dans la partie suivante, nous utiliserons le module *emcee* utilisant des

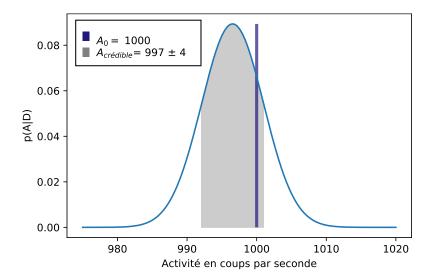


FIGURE 3.2 – Activité de l'échantillon inférée par méthode bayésienne à partir d'un échantillon $D = \{A_i, e_i\}$. La zone centrale grise représente l'intervalle de crédibilité.

techniques d'échantillonnage avec méthode de Monte-Carlo par chaîne de Markov. Ces techniques sont particulièrement adaptés lorsque le modèle se complexifie.

3.2.2 Deuxième cas : détermination de deux paramètres et leur incertitude

Cet exemple est similaire au cas précédant. Nous allons étudier l'activité radioactive d'un échantillon. A la différence de précédemment, cet activité A_0 fluctue aléatoirement dans le temps. Nous réalisons une série de n mesures : $D = \{A_i, e_i\}$.

Nous cherchons donc à déterminer deux paramètre : $\theta = [\mu_A, \sigma_A]$, avec μ_A la valeur moyenne de l'activité et σ_A l'écart type associée aux fluctuations intrinsèques de la source. L'activité suit donc le modèle suivant :

$$A_0 \propto \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_A^2}} e^{\left[-\frac{(A-\mu)^2}{2\sigma_A^2}\right]}$$
(3.7)

Génération des données

Le bloque de code suivant permet de générer les données :

$Création\ d'une\ série\ de\ données\ pour\ l'accélération\ de\ la\ pesanteur$ import numpy as np

```
# Pour la répétabilité:
# les données sont aléatoires mais fixées avec ce paramètre
np.random.seed(42)

N = 50 # Nombre de mesures
# Valeur de référence de l'activité radioactive
# de l'échantillon en coups par seconde et écart type du modèle
mu_A, sigma_A = 1000, 30

A0 = stats.norm(mu_A, sigma_A).rvs(N) #Activité de référence fluctuante
Ai = stats.poisson(A0).rvs(N) # Réalisation des N mesures
ei = np.sqrt(Ai) # écart type estimé pour une loi de Poisson
```

Approche classique d'inférence

Une approche classique consiste à définir une fonction de deux paramètres maximisant la probabilité que les données vérifient le modèle. Cette technique est identique à celle utilisée pour la régression linéaire qui minimise l'erreur entre une courbe et une série de point, et donc consiste à trouver des paramètres maximisant la probabilité que les données vérifie le modèle.

La fonction de vraisemblance utilisé est l'association des distributions statistique de la source et les incertitudes de mesure. Les deux processus ne sont pas corrélés, nous allons utiliser un modèle gaussien dont l'écart type est : $\sigma_A^2 + e_i$:

$$\mathcal{L}(D|\theta) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_A^2 + e_i^2)}} e^{\left[-\frac{(A_i - \mu_A)^2}{2(\sigma_A^2 + e_i^2)}\right]}$$
(3.8)

Ici, θ représente le modèle, donc l'hypothèse à vérifier.

Il n'est pas possible d'utiliser des modèles analytiques pour trouver une solution. Des procédures numériques existent et permettent de déterminer les valeurs optimales de μ_A et σ_A avec leur incertitude associées.

Le principe consiste à générer un grand nombre de sous-ensembles de données à partir des données initiales ⁵. Chacun de ces sous-ensembles est alors traité comme une réalisation des mesures pour lequel la valeur moyenne et l'écart type est calculé. Il est ainsi possible d'obtenir un ensemble de valeurs moyennes et d'écarts types et ainsi d'obtenir l'incertitude sur ces deux grandeurs.

^{5.} algorithme de bootstrap ou jacknife

Résultats avec techniques bootstrap et maximisation d'une fonction de vraisemblance :

```
Valeurs théoriques \mu = 1000\,\mathrm{s}^{-1} \sigma = 10\,\mathrm{s}^{-1}
Valeurs inférées \mu = 1000 \pm 4\,\mathrm{s}^{-1} \sigma = 14 \pm 6\,\mathrm{s}^{-1}
```

Les intervalles données ci-dessus sont les intervalles de confiance à 68%. Ces derniers supposent que la statistique d'incertitude est gaussienne suivant μ et σ . Cela donne une zone de confiance rectangulaire centrée sur $\mu=1000$ et $\sigma=14$ de côtés les intervalles de confiance. Nous allons voir que l'approche bayésienne permet d'aller plus loin.

Approche par inférence bayésienne

De même que précédemment, nous définissons le logarithme du prior, de la fonction de vraisemblance et de la probabilité postérieure. La fonction de vraisemblance est identique (équation 3.8) à celle définie pour une approche classique.

Le calcul du postérieur est encore envisageable avec une procédure naïve pour deux paramètres à inférer. La technique consister à calculer les valeurs de log(p) pour chaque couple (μ, σ) dans une fenêtre donnée.

```
# Calcul du postérieur
# Nombre de points
Nb_mu = 200
Nb sig = 200
```

```
# Création des tableaux pour mu et sigma
 mu line = np.linspace(990,1010,Nb mu)
  sig_line = np.linspace(0,30,Nb_sig)
  # Création du maillage
 mu_mesh, sig_mesh = np.meshgrid(mu_line, sig_line)
  # Initialisation du log du postérieur
 logP = np.zeros([Nb mu,Nb sig])
  # Calcul du postérieur avec double boucle
 for i in tqdm(range(Nb mu)):
     var mu = mu line[i]
      for j in range(Nb_sig):
          var_sig = sig_line[j]
          logP[j,i] += log_posterior(var_mu, var_sig, Ai, ei)
  # Normalisation à 1
 logP -= np.max(logP)
 p = np.exp(logP)
  # Valeur la plus probable
 result = np.where(p == np.amax(p))
Et le tracé de la distribution postérieur comme présenté en figure 3.3 :
  # Affichage graphique
 fig, ax = plt.subplots()
 ax.pcolor(mu_mesh, sig_mesh, p)
 levels = [0.68, 0.95]
 CS = ax.contour(mu mesh, sig mesh,p, levels, colors='k', linewidths = 0.7)
 ax.plot([mu_A], [sigma_A], 'o', color='red', ms=4);
 ax.text(mu_line[result[1]][0],sig_line[result[0]][0], '+' )
```

Les courbes représentent les zones de crédibilité à 68% et 95%. La forme générale de la distribution n'est plus gaussienne et les zones de crédibilités sont plus restreintes. Le résultat final est identique à celui obtenu par méthode classique :

Résultats avec techniques d'inférence bayésienne :

```
Valeurs théoriques \mu = 1000 \, \mathrm{s}^{-1} \sigma = 10 \, \mathrm{s}^{-1}
Valeurs inférées \mu = 1000 \pm 4 \, \mathrm{s}^{-1} \sigma = 14 \pm 6 \, \mathrm{s}^{-1}
```

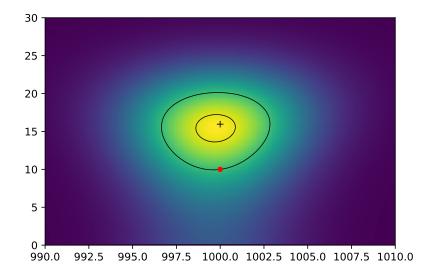


FIGURE 3.3 – Modèle aléatoire de l'activité de l'échantillon inféré par méthode bayésienne à partir d'un ensemble de mesures $D = \{A_i, e_i\}$. La croix représente la valeur la plus probable, le point rouge représente la valeur théorique.

3.3 Prise en compte de données a priori

Cette partie est consacrée à l'influence de la probabilité *a priori*. L'exemple proposé est l'analyse de données d'une mesure de résistance. Les données sont simulées numériquement, mais les incertitudes associées sont celles fournies par la documentation du multimètre numérique agilent 34401.

3.3.1 Positionnement du problème

Une résistance à 5% de valeur nominale $R_{\rm nom}=500\,\Omega$ est déterminée au moyen d'une méthode volt-ampèremétrique. La valeur réelle de la résistance est Rvrai = 512 Ω . Les caractéristiques de la mesure sont données dans le tableau ci-contre :

$$\sigma_U = 0,002 \,\mathrm{mV}$$
 $\sigma_I = 0,01 \,\mathrm{mA}$
 $\sigma_R = 5 \,\Omega$

Les valeurs U et I sont tirées aléatoirement avec une loi normale d'écart type donnée par les caractéristiques de la mesure.

3.3.2 Fonction de vraisemblance

La fonction de vraisemblance reflète la loi normale choisie pour représenter l'incertitude sur les mesures. Pour une mesure, la probabilité $p(R_i = \frac{U_i}{I_i}|R_0)$ est donnée par la relation suivante :

$$p(R_i = \frac{U_i}{I_i} | R_0, \sigma_R) = \frac{1}{2\pi\sigma_R} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{R_i - R_0}{\sigma_R}\right)^2\right]$$
(3.9)

Pour une ensemble de n mesures $\{R_i\}$, la fonction de vraisemblance est le produit des probabilités $p(R_i = \frac{U_i}{I_i}|R_0, \sigma_R)$:

$$p(\{R_i\}|R_0, \sigma_R) = \prod_{i=0}^n \frac{1}{2\pi\sigma_R} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{R_i - R_0}{\sigma_R}\right)^2\right]$$
(3.10)

3.3.3 Choix du prior

L'objectif est d'étudier l'influence de la probabilité a priori $p(R_0)$ sur la probabilité postérieure.

Nous allons utiliser deux priors différents se basant sur les connaissances suivantes de la valeur de résistance :

- données constructeurs : prior quasi non informatif, une fonction uniforme sur l'intervalle défini par la tolérance de la résistance est utilisée
- mesure précédente : prior suivant une loi normale $R_{\rm prior}=490\pm 2\,{\rm ohm}.$

Ces deux priors correspondent à des situations concrètes de mesure, dans le premier cas seuls les informations constructeurs servent de base, dans le second cas une mesure rapide a été réalisée avec un ohmmètre donnant un résultat cohérent mais éloigné de la valeur réelle.

3.3.4 Tracé de la probabilité a prosteriori

Comme dans les parties précédentes, la probabilité a posteriori est définie par :

$$p(R_0|\{R_i\}, \sigma_R) \propto p(R_0) \times p(\{R_i\}|R_0, \sigma_R)$$
 (3.11)

Une normalisation est ensuite réalisée pour obtenir une distribution. Les résultats sont tracées en figure 3.4.

La probabilité a posteriori est tracée avec un nombre différent de mesure. Le cas N=0 correspond au tracé du prior, une distribution normale et uniforme est bien retrouvé et correspondent aux informations précédant toutes mesures. Avec l'augmentation du nombre de mesures, les probabilités obtenues s'affinent de plus en plus et tendent toutes les deux vers une seule et même valeur la plus probable : $R_0(p_{\rm max})=512\,\Omega$ qui est bien la valeur vraie de la résistance.

3.3.5 Code Python

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import stats
# Pour la répétabilité
np.random.seed(10)
#Nombre de mesures :
N = 1
#Valeur réelle de la résistance en Ohm
R vrai = 512
#Etude d'une résistance nominal de 500 Ohm à 5%
R nom = 500
Rtol = 0.03
#Mesure : méthode voltampéremétrique
\#I = 1mA fixée et connue à 0.1mA
#U mesuré à 1mV
#Incertitude gaussienne, incertitude = agilent multimeter 34401a
IO = 1 \#mA
sigmaIO = 0.01 #mA résistance de shunt = 0.1 Ohm
UO = 512 \#mV
sigmaU0 = 0.002 \#mV
I_mes = stats.norm.rvs(size = N, loc = I0, scale = sigmaI0)
U_mes = stats.norm.rvs(size = N, loc = U0, scale = sigmaU0)
R_mes = U_mes / I_mes
sigma_R = 5
# Définition des probabilités pour inférence bayésienne
def log_prior_uniforme(theta):
    \#g_i needs to be between 0 and 1
    if (theta < R nom*(1+Rtol)) and (theta > R nom*(1-Rtol)):
        return 0
```

```
else:
    return -np.inf # recall log(0) = -inf

def log_likelihood(theta):
    return - np.sum(((theta-R_mes)**2)/(2*sigma_R**2))

def log_posterior(theta):
    return log_prior_uniforme(theta) + log_likelihood(theta)

# Calcul de la probabilité postérieure
R_line = np.linspace(470, 535, 200)
logpost = [] #initialisation du logarithme du postérieur
for R in R_line:
    logpost.append(log_posterior(R))
post = np.exp(logpost)
post /=np.trapz(post, R_line)

# Tracé graphique
plt.plot(R_line, post)
```

3.3.6 Conclusions

Le prior a un effet important quand le nombre de mesures est faible, mais il tend à s'effacer rapidement avec l'augmentation de données empiriques. Les conclusions sont identiques et indépendantes du choix initiales pour le prior.

A l'inverse, il est très important de réaliser un choix judicieux et éclairé du prior quand le nombre de mesure est faible. Ce dernier permet d'intégrer toute les connaissances liées à la grandeur mesurée, et permet d'une certaine manière une mise à jour de cette grandeur sous l'éclairage de nouvelles mesures.

Cette notion de probabilité *a priori* est une critique récurrente associée à la démarche d'inférence bayésienne. Cependant, il est souvent possible de formaliser des choix rationnels et objectifs pour le prior et reflétant les connaissances préalables à la mesure. L'avantage est qu'il permet justement de prendre en compte un certain nombre de connaissances liées à la mesure car il est rare de réaliser une mesure sans aucune intuition ou contrainte sur le résultat.

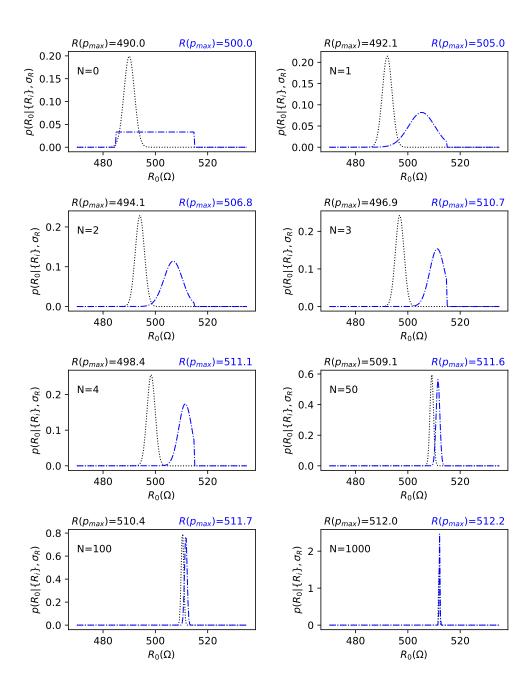


FIGURE 3.4 – Influence du nombre de mesures et du prior sur le résultat final de la probabilité $a\ posteriori.$

Chapitre 4

Applications de l'inférence bayésienne à l'analyse de données

Ce chapitre portera sur quelques exemples d'application de l'inférence bayésiennes. Le chapitre 3 a permis d'introduire cette méthodes et de montrer sa cohérence avec les techniques d'inférence classique. Ce chapitre porte sur des situations où les techniques classiques sont inadaptées.

4.1 Analyse statistique d'une panne de machine

4.1.1 Présentation du problème

Cette partie est un exemple détaillé par E.T Jaynes dans Confidence Intervals vs Bayesian Intervals.

Prenons une installation industrielle dont le fonctionnement nécessite des pièces d'usures. A partir d'un instant θ , l'usure devient telle que la machine devient sujette à des pannes. La probabilité qu'une panne se déclenche suit une loi exponentielle.

Il est trop couteux pour l'industriel de réaliser des vérifications régulières des pièces ainsi que les changer trop régulièrement.

A device will operate without failure for a time θ because of a protective chemical inhibitor injected into it; but at time θ the supply of the chemical is exhausted, and failures then commence, following the exponential failure law. It is not feasible to observe the depletion of this inhibitor directly; one can observe only the resulting failures. From data on actual failure times, estimate the time θ of guaranteed safe operation...

La probabilité qu'une panne se produite à un instant t est donnée par la

distribution suivante:

$$p(t|\theta) = \begin{cases} \exp(\theta - t) & , t > \theta \\ 0 & , t < \theta \end{cases}$$
(4.1)

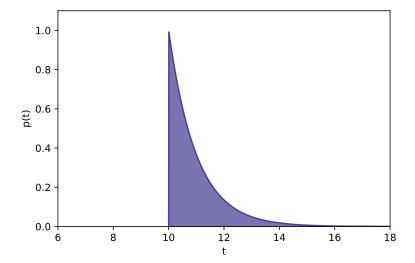


FIGURE 4.1 – Distribution exponentielle : modélisation d'un risque aléatoire de panne. Ici $\theta=10$.

Les données recueilli par l'industriel sont : $D = \{10, 12, 15\}$ en semaines. L'objectif est de trouver une estimation de θ connaissant $D = \{t_i\}$.

Étant donnée la forme générale de la distribution, il est évident que θ doit être plus petit que la plus petite valeur observée : $\theta \leq \min(D)$.

4.1.2 Approche classique

Connaissant la forme de la distribution, il est montré qu'un estimateur de θ est 1 :

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} t_i - 1 \tag{4.2}$$

Il est possible d'approcher l'intervalle de confiance par une loi normale d'écart type $\sigma = 1$, ce n'est pas rigoureusement l'intervalle de confiance réel pour cette loi,

^{1.} On montre que $E(t) = \int_0^\infty t p(t) dt = \theta + 1$

mais cela ne modifie pas les conclusions. l'intervalle de confiance est donc :

$$\hat{\theta} \pm \frac{1}{\sqrt{n}} \tag{4.3}$$

Soit : $\theta_{\text{estimé}} = 12.3 \pm 0.6 = [11.7; 12.9]$

L'intervalle de confiance est entièrement en dehors de la zone dans laquelle doit se trouver θ . C'est principalement lié au faible nombre de données. Ceci étant, pour ce type de problème, le nombre de données ne sera jamais élevé puisqu'il faut attendre une panne arrivant à un délais supérieur à 10 semaines pour ajouter un point à la statistique.

4.1.3 Approche bayésienne

Commençons par écrire le théorème de Bayes :

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta) \cdot p(\theta)}{p(D)} \tag{4.4}$$

Nous allons utiliser un prior non informatif : $p(\theta) = 1$ et une fonction de vraisemblance de la forme :

$$p(D|\theta) = \prod_{i=1}^{n} p(t|\theta)$$
(4.5)

Le produit d'exponentielles tronquées donne :

$$p(D|\theta) \begin{cases} n \exp\left[n\left(\theta - \min(D)\right)\right] &, \theta < \min(D) \\ 0 &, \theta > \min(D) \end{cases}$$

$$(4.6)$$

Dans la mesure où l'exponentielle est une fonction croissante, le plus petit intervalle $[\theta_{\min}; \theta_{\max}]$ contenant 65% des valeurs est donnée par :

$$\int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} n \exp\left[n\left(\theta - \min(D)\right)\right] d\theta = 0.65 \tag{4.7}$$

avec $\theta_{\text{max}} = \min(D)$ qui vérifie l'approche de bon sens.

Et donc:

$$\theta_{\min} = \theta_{\max} + \frac{\log(1 - 0.65)}{n}$$
 (4.8)

Ce qui donne l'intervalle de crédibilité suivant : $\theta_{\text{estimé}} = [9,65;10]$

Sans surprise, nous constatons que l'approche bayésienne vérifie le bon sens et permet de définir un intervalle pendant lequel planifier l'intervention sur l'installation industrielle avant que cette dernière ne tombe en panne.

4.2 Problème de la position du phare

Un phare est positionné sur des récifs au large d'une côte. Sa position et sa distance à la côte sont inconnue. Il émet aléatoirement des faisceaux étroits de lumière dans des directions aléatoires. Une série de photo-détecteurs sont placés le long de la côte et permettent simplement de détecter qu'un faisceau a été émis : la direction dans laquelle il a été émis est inconnue.

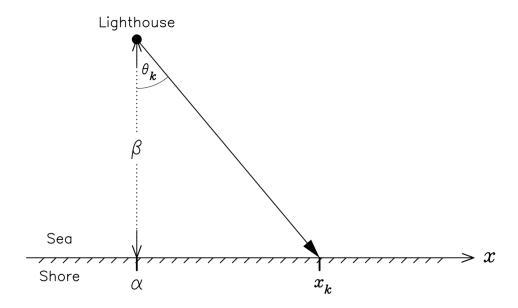


FIGURE 4.2 – Illustration de la géométrie du problème de la détermination de la position d'un phare.

Les données sont un ensemble $D = \{x_k\}$ de position pour laquelle un flash a été enregistré. Où est situé le phare?

4.2.1 Analyse du problème

Il est raisonnable de penser que les flashs sont émis uniformément suivant un angle θ_k autour du phare, en direction de la côte :

$$p(\theta_k|\alpha,\beta) = \frac{1}{\pi} \tag{4.9}$$

Les notations utilisées sont celles définies dans la figure 4.2. Les flashs ayant lieu vers le demi espace supérieur ne sont reçus par aucun capteur et sont perdus, tout se passe comme si le phare n'émettait que vers la côte.

En reliant
$$\theta_k$$
 à x_k :
$$\beta \tan \theta_k = x_k - \alpha \tag{4.10}$$

Ainsi, en réécrivant l'équation 4.9 :

$$p(x_k|\alpha,\beta) = \frac{1}{\pi} \frac{\beta}{\beta^2 + (x_k - \alpha)^2}$$
(4.11)

Dans ce problème, la probabilité de mesurer un flash à la position x_k connaissant les coordonnées (α, β) du phare est décrite pas une distribution de Cauchy ². Cette distribution possède un maximum en $x_k = \alpha$ et une largeur à demi hauteur de 2β comme montré sur la figure 4.3.

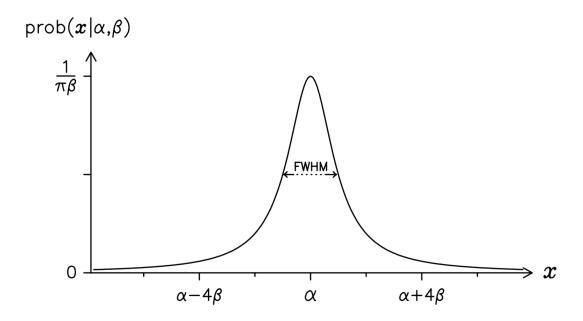


FIGURE 4.3 – Distribution de Cauchy.

L'objectif est d'estimer la position (α, β) du phare. Pour des raisons de clarté, nous allons considérer β comme connue et fixée dans un premier temps et chercher à déterminer α uniquement. L'application du théorème de Bayes donne la relation suivante :

$$p(\alpha|\{x_k\},\beta) \propto p(\{x_k\}|\alpha,\beta) \cdots p(\alpha,\beta)$$
 (4.12)

2. C'est une fonction de Lorentz.

Le prior $p(\alpha, \beta)$

Nous allons choisir un prior faiblement informatif : le phare est situé dans une plage $\{\alpha_{\min}; \alpha_{\max}\} \times \{\beta_{\min}; \beta_{\max}\}$

Les valeurs minimal et maximal sont complètement arbitraires et peuvent être aussi larges que souhaité si nous n'avons aucune idée de la position du phare ou au contraire plutôt réduites si une zone plus précise dans laquelle peut se situer le phare est définie.

$$p(\alpha, \beta) = \begin{cases} 1, & \text{si } \alpha_{\min} < \alpha < \alpha_{\max} \text{ et } \beta_{\min} < \beta < \beta_{\max} \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$
(4.13)

Fonction de vraisemblance $p(\lbrace x_k \rbrace | \alpha, \beta)$

Les données mesurées proviennent d'événements indépendants, la probabilité d'obtenir un ensemble $\{x_k\}$ est simplement le produit des probabilités x_k :

$$p(\lbrace x_k \rbrace | \alpha, \beta) = \prod_{k=1}^{n} p(x_k | \alpha, \beta)$$
 (4.14)

Ce qui donne:

$$\log(p(\lbrace x_k \rbrace | \alpha, \beta)) = n \log \beta - \sum_{k=1}^{n} \log \left(\beta^2 + (x_k - \alpha)^2 \right)$$
 (4.15)

4.2.2 La probabilité a postériori et recherche de la valeur de α la plus crédible

Nous allons considérer que le prior est suffisamment large pour pour ne pas s'en soucier dans l'écriture du postérieur. Numériquement, ce prior permet de délimiter les zones de tracé ou de recherche des solutions.

$$\log(p(\alpha|\{x_k\},\beta)) = \text{constante} - \sum_{k=1}^{n} \log(\beta^2 + (x_k - \alpha)^2)$$
 (4.16)

La meilleur estimation pour la valeur de α est donnée pour le maximum de la relation donnée en 4.16. Analytiquement, cette relation est extrêmement difficile à inverser pour exprimer α en fonction des données du problème. Numériquement, c'est un problème simple à résoudre : il suffit de tracer cette probabilité en fonction de α et de rechercher la valeur maximum graphiquement. Ce tracé est réalisé en figure 4.4 pour des valeurs $(\alpha, \beta) = (5, 4)$.

La figure 4.4 montre l'évolution du postérieur en fonction du nombre de données. Le maximum de probabilité vaut $\alpha_{\text{max}} = 4,70 \text{ km}$ pour N = 100. La distribution que suit α en fonction du nombre de point N tend vers une forme piquée sur la valeur vraie de α . Il est à remarquer que pour de faibles valeurs de N, cette probabilité peut devenir multimodale : des maxima principaux et secondaires apparaissent. Il très difficile de pouvoir utiliser les outils classiques que sont la valeur moyenne et l'écart-type pour décrire cette distribution ou en tirer des informations.

L'analyse bayésienne présente ainsi l'avantage de prendre en compte toute la complexité du problème et d'en donner une réponse adéquate.

En ce qui concerne la valeur moyenne, il peut sembler surprenant de constater qu'elle ne semble pas tendre vers une valeur centrale, comme le laisserait supposer une application du théorème de la limite centrale. De plus, cette valeur est très éloignée de la zone la plus probable pour α , ce qui en fait un mauvais estimateur pour ce problème.

Ici, la distribution statistique des positions sur la côte est pilotée par la distribution de Cauchy. Cette dernière ne possède ni valeur moyenne, ni écart type, ce qui explique le comportement erratique de la valeur moyenne et le fait que le théorème de la limite centrale ne s'applique pas.

Recherche de α et β

La démarche précédente s'étend sans difficultés aux paramètres (α, β) . Il s'agit d'un problème à deux dimensions dont la démarche de résolution est similaire à celui présenté en 4.5.

Cette technique permet de déterminer les positions les plus probables en fonction des deux dimensions de la position du phare. Avec suffisamment de points, la position du phare est déterminée avec une bonne précision.

4.2.3 Conclusion

L'analyse de données ne peut se limiter à fournir une valeur moyenne et un écart type ou une série de paramètres issues d'une régression. Il faut garder à l'esprit qu'un tel résultat sous-entend toujours une loi normale, or ce n'est pas toujours le cas. Prenons simplement l'exemple d'une mesure de masse, est-il raisonnable d'écrire $m=7\pm 8\,\mathrm{g}$ pour un intervalle de confiance à 95%? Il est évident qu'une masse négative n'a pas de sens.

En mettant de côté la bizarrerie de la distribution de Cauchy³ de ne pas posséder de valeur moyenne ou d'écart type, il existe des situations où la probabilité postérieure ne saurait se résumer à une simple loi normale. Dans beaucoup de

^{3.} Qui est utilisée pour décrire les raies spectroscopiques.

situations, cette probabilité est asymétrique ou multimodale, ce qui rend non pertinent la description par une simple valeur moyenne.

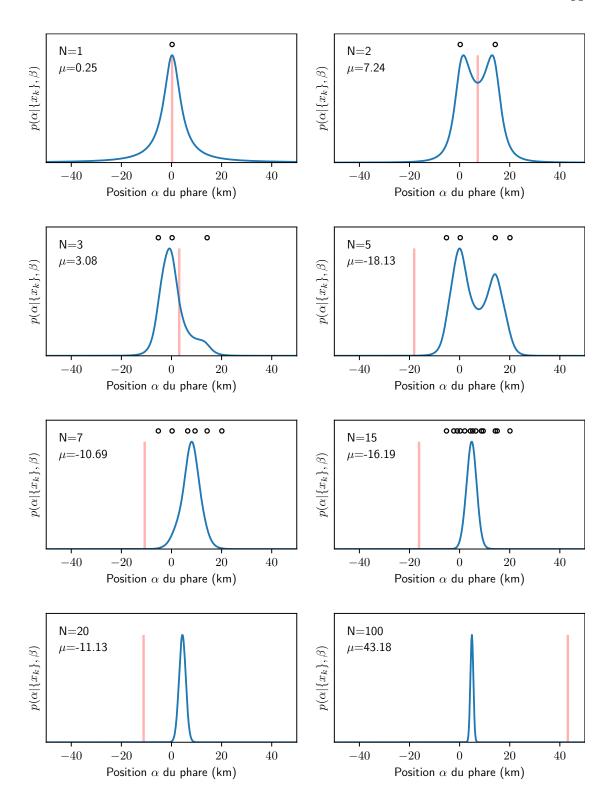


FIGURE 4.4 – Probabilité postérieure de la position α du phare le long de la côte en fonction du nombre de données. Le nombre de données et la moyenne de ces dernières sont indiqués en haut à gauche de chaque graphique. La valeur moyenne est représentée par un trait verticale.

$p(\alpha, \beta | \{x_k\})$

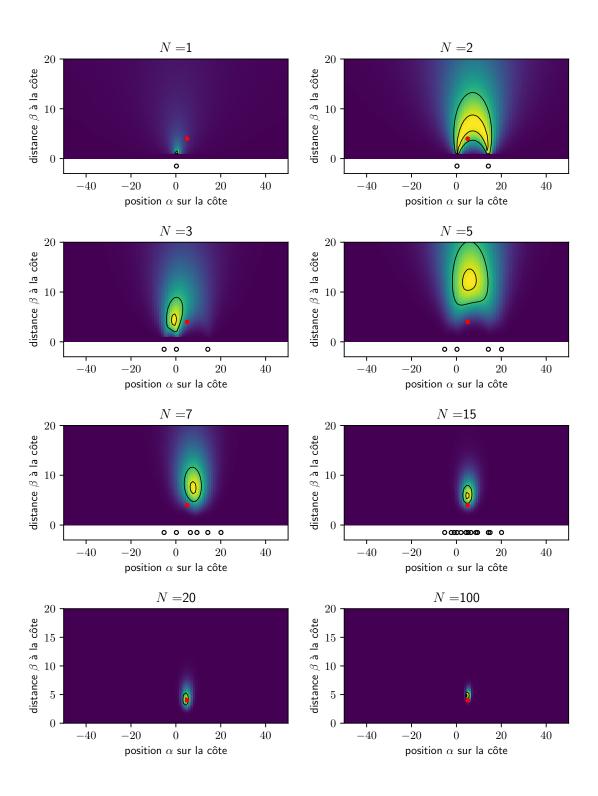


FIGURE 4.5 – Probabilité postérieure des coordonnées α et β du phare. Le nombre de données est indiqué en haut de chaque graphique. La position exacte du phare est représentée par un point rouge.

4.3 Module EMCEE pour Python

EMCEE ⁴ est une implantation Python d'un méthode de Monte-Carlo par chaîne de Markov. Cette méthode permet d'échantillonner des distributions statistiques et d'en déterminer les caractéristiques.

Références:

- Ensemble samplers with affine invariance, J. Goodman and J. Weare
- EMCE documentation
- lecture Astrostat C. Miller. www.astro.umd.edu/miller/teaching/astrostat/lecture10.pdf
- Emcee: the MCMC Hammer, D. Foreman-Mackey, D. W. Hogg, D. Lang, J. Goodman

L'intérêt de cet algorithme est sa capacité à rapidement converger vers une distribution satisfaisant la probabilité postérieure et d'en dessiner une image. Jusqu'à présent, il a été possible de tracer numériquement cette probabilité dans la mesure où les problèmes rencontrés ont peu de paramètres (maximum 2 jusqu'à présent). La difficulté de cette méthode directe est qu'elle est trop couteuse en temps de calcul pour des modèles avec beaucoup de paramètres, et certains nécessitent autant de paramètres que de données.

4.3.1 Retour sur le problème de la position du phare

Reprenons l'analyse précédente en traitant numériquement le problème avec le module EMCEE. L'analyse du problème est strictement identique, seul la recherche des paramètres α et β optimaux et le tracé diffèrent.

```
#algorithme emce : détermination des paramètres a et b
ndim = 2  # number of parameters in the model
nwalkers = 200  # number of MCMC walkers
nburn = 3000  # "burn-in" period to let chains stabilize
nsteps = 6000  # number of MCMC steps to take

# Estimation pour l'initialisation des "walkers"
starting_guesses = np.random.rand(nwalkers, ndim)
starting_guesses[:,0] = 50 *starting_guesses[:,0] -25
starting_guesses[:,1] *= 25
starting_guesses[:,1] += 0

sampler = emcee.EnsembleSampler(nwalkers, ndim, log_posterior, args=[c_pos])
```

^{4.} module Python sous licence MIT

```
sampler.run_mcmc(starting_guesses, nsteps)

sample = sampler.chain
sample = sampler.chain[:, nburn:, :].reshape(-1, 2)

# Tracé graphique
from astroML.plotting import plot_mcmc
fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 10))
plot_mcmc(sample.T, fig=fig, labels=[r'position a sur la côte',...
    r'distance b à la côte'], colors='k')
plt.plot(sample[:, 0], sample[:, 1], ',k', alpha=0.1)
plt.ylim(-2, 50)
plt.ylim(-50,50)
plt.plot(a, b, 'o', color='red', ms=10);
```

L'algorithme EMCEE fonctionne de la manière suivante : des walkers sont initialisés à des positions estimées et proche de la solution recherchée. Ici, les walkers pour a et b sont initialisés aléatoirement dans la zone a = [-50, 50] et b = [0, 50]. Ensuite, un nombre d'étapes est défini pour laisser le temps aux walkers d'explorer la distribution et de perdre la mémoire de leur position initiale, c'est la phase de burn-in. Les données acquises durant cette phase sont simplement éliminées. Enfin, après cette première phase, un certain nombre d'étapes sont laissées aux walkers pour explorer pleinement la distribution.

Le nombre d'étape de chacune des deux phases dépend de la complexité du problème.

Ensuite la distribution est tracée comme montré en figure 4.6. Les zones sombres sont des zones fortement explorées par les *walkers* et correspondent aux zones où la probabilité postérieure est grande.

4.4 Régression et élimination des données aberrantes

Références:

- Notice en ligne EMCE
- Data analysis recipes : Fitting a model to data, D.W. Hogg, J. Bovy, D. Lang

Avec le module EMCEE et les techniques d'inférences bayésiennes, il est possible de définir des modèles de régression suffisamment complexes pour détecter et éliminer les valeurs aberrantes d'un ensemble de données. En effet, l'enjeu est

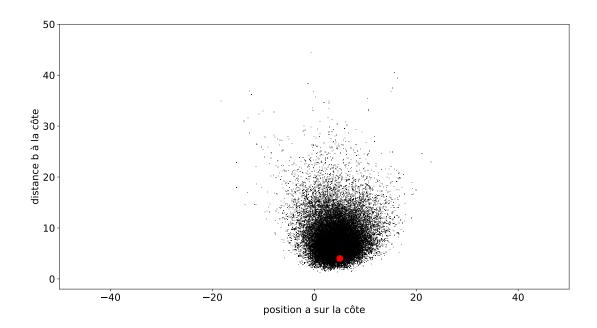


FIGURE 4.6 – Probabilité postérieure des coordonnées α et β du phare calculé au moyen de l'algorithme EMCE.

important dans la mesure où la régression linéaire classique est très sensible aux valeurs aberrantes. Il existe des techniques de correction pour rendre ces régressions moins sensible 5 aux valeurs aberrantes, mais ces techniques ont des limites et à défaut d'éliminer complètement les valeurs aberrantes, elles réduisent le poids de ces dernières.

^{5.} Fonction objectif d'Huber, par exemple.

4.4.1 Positionnement du problème

L'objectif est de trouver les meilleurs coefficients a et b d'un modèle affine y = ax + b pour une série de données obtenues par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \{x_i\} = & \text{distribution uniforme sur l'intervalle } [0, 100] \\ \{\sigma_i\} = & \text{distribution uniforme sur l'intervalle } [2, 22] \\ \{y_{\text{err}}\} = & \mathcal{N}(0, \{\sigma_i\}) \\ \{y_i\} = & a \cdot \{x_i\} + b + \{y_{\text{err}}\} \end{cases}$$

$$(4.17)$$

Les données aberrantes sont ensuite inclues dans l'ensemble des données. Le code Python indiqué ci-dessous permet la génération de données décrite précédemment.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import stats
from tqdm import tqdm
# Pour la répétabilité
np.random.seed(10)
# Paramètre du modèle
a true = 2
b true = -5
# Generation de données à partir du model
N = 20
x = 0.5 + np.sort(99 * np.random.rand(N))
sigma = 2 + 20 * np.random.rand(N)
y = a true * x + b true
yerr = stats.norm.rvs(size = N, loc = 0, scale = abs(sigma))
y+= yerr
# Ajout de valeurs aberrantes
NbOutliers = 3
Nrand = np.random.randint(0,N-1,size = NbOutliers)
y[Nrand] = [174.5, 115.9, 95.9]
```

Un modèle de régression linéaire tel que décrit dans le chapitre 2 est ajoutée à la représentation graphique des données en figure 4.7. Ce dernier est lourdement influencé par les quelques données aberrantes et ne permet pas de décrire la relation linéaire qui se dessine intuitivement avec les données valides.

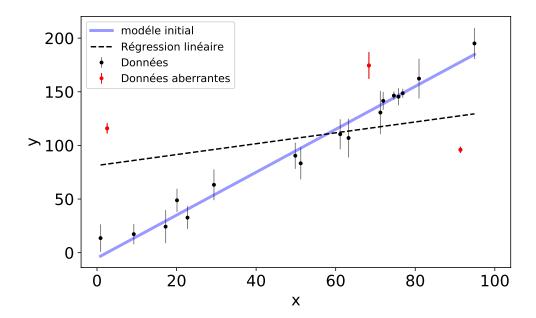


FIGURE 4.7 – Données issues d'un tirage aléatoire suivant une loi normale d'écart type $\sigma \approx 10$ et centrée sur chaque point $y_i = ax_i + b$, avec a = 2 et b = -5. Des données aberrantes décorrélées de la relation affine initiale sont inclues dans l'ensemble des données et représentées en rouge.

4.4.2 Construction du modèle

Caractéristique des données valides

Le modèle initiale est similaire à celui décrit par la relation 2.5 : Il faut chercher un extremum d'une fonction chiffrant l'écart du modèle aux données.

Nous allons supposer que l'incertitude associée à chaque point suit une loi normale. La probabilité d'avoir les données $D = \{x_i, y_i, \sigma_i\}$ connaissant le modèle

H = (a, b) est:

$$p(\{x_i, y_i, \sigma_i\} | (a, b)) = p(D|H) = \prod_{i=0}^{n} \frac{1}{2\pi\sigma_i} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{ax_i + b - y_i}{\sigma_i}\right)^2\right]$$
(4.18)

Chaque terme du produit est simplement une probabilité donnée par une loi normale d'écart type σ_i et de valeur centrale $ax_i + b$ donnée par le modèle. En utilisant cette probabilité comme fonction de vraisemblance et en prenant un prior uniforme, l'utilisation du théorème de Bayes conduit à minimiser la même grandeur que celle définie par la relation 2.5, et cela conduit au modèle de la régression linéaire.

Caractéristique des données aberrantes

Une donnée aberrante est une donnée qui n'est pas corrélée ⁶ au phénomène dont on mesure une grandeur mais qui suit une statistique indépendante du modèle :

$$\frac{1}{2\pi\sigma_A} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{Y_A - y_i}{\sigma_A}\right)^2\right] \tag{4.19}$$

Association des deux caractéristiques

Pour combiner les deux aspects, il est possible de construire une probabilité reposant sur des paramètres $\{g_i\}$ chiffrant le caractère aberrant ou non d'une données. g_i est un paramètre supplémentaire associé à chaque point et variant de 0 à 1 :

- g_i proche de 1, le point est une donnée valide;
- g_i proche de 0, le point est une donnée aberrante.

L'association des données aberrantes et valides se fait donc au travers de la probabilité suivante :

$$\begin{cases}
f(g_i) = \begin{cases}
1, & \text{si } g_i > g_0 \\
0, & \text{si } g_i < g_0 \\
p(x_i, y_i, \sigma_i | (a, b), g_i) = \frac{f(g_i)}{2\pi\sigma_i} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{ax_i + b - y_i}{\sigma_i}\right)^2\right] + \frac{1 - f(g_i)}{2\pi\sigma_A} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{Y_A - y_i}{\sigma_A}\right)^2\right] \\
(4.20)
\end{cases}$$

Suivant la valeur de g_i , la probabilité suivie est soit celle d'une donnée valide, soit celle d'une donnée aberrante.

^{6.} Ce choix est discutable pour une mesure réelle, mais par soucis de simplification, c'est le modèle qui est retenu pour cet exemple.

Fonction de vraisemblance, prior et probabilité postérieure

Un prior uniforme 7 est utilisé, par soucis de simplicité :

$$p(a,b) \propto 1 \tag{4.21}$$

La fonction de vraisemblance est simplement le produit des probabilités p :

$$p(\{x_i, y_i, \sigma_i\} | (a, b), \{g_i\}) = \prod_{i=0}^{n} p(x_i, y_i, \sigma_i | (a, b), g_i)$$
(4.22)

La probabilité postérieure est donc :

$$p((a,b), \{g_i\}|\{x_i, y_i, \sigma_i\}) = p(H, \{g_i\}|D) \propto \prod_{i=0}^{n} p(x_i, y_i, \sigma_i|(a,b), g_i)$$
 (4.23)

Code python

Les probabilités précédentes sont définies numériquement au moyen de logarithme pour en facilité le calcule numérique.

```
# Probabilité inférence bayésienne
# theta est un tableau contenant tous les paramètres :
# theta [0] : b
# theta[1] : a
# theta[2:] : qi
def log prior(theta):
    \#q_i needs to be between 0 and 1
    if (all(theta[2:] > 0) and all(theta[2:] < 1)):</pre>
        return 0
    else:
        return -np.inf # recall log(0) = -inf
def log_likelihood(theta, x, y, e, sigma_B):
    dy = y - theta[0] - theta[1] * x
    dyA = np.mean(y) - y
    g = np.clip(theta[2:], 0, 1) # g<0 or g>1 conduit \tilde{a} des NaN
    for i in range(len(g)): # fonction f stocké dans g
        if g[i] < 0.5 : g[i] = 0
        else : g[i]=1
```

^{7.} Concernant le paramètre a, le prior n'est pas non informatif. En effet, il faudrait choisir une probabilité a tel que la probabilité que la droite fasse un angle α avec l'horizontale soit uniforme.

```
logL1 = np.log(g) - 0.5*np.log(2*np.pi*e**2) - 0.5*(dy/e)**2
logL2 = np.log(1 - g) - 0.5*np.log(2*np.pi*sigma_B**2) - 0.5*(dyA/sigma_B)**2
return np.sum(np.logaddexp(logL1, logL2))

def log_posterior(theta, x, y, e, sigma_B):
```

return log prior(theta) + log likelihood(theta, x, y, e, sigma B)

4.4.3 Paramètres de nuisance

Les paramètres $\{g_i\}$ sont des paramètres de nuisance. Un paramètre de nuisance est nécessaire au modèle retenu, mais n'apporte aucune information concernant le résultat final. L'opération visant à les faire disparaitre est appelée marginalisation des paramètres de nuisance et consiste à intégrer la probabilité sur l'ensemble des valeurs de ces paramètres :

$$p((a,b)|\{x_i,y_i,\sigma_i\}) = p(H|D) = \int_{\{g_i\}} p((a,b),\{g_i\}|\{x_i,y_i,\sigma_i\}) dg_i \qquad (4.24)$$

4.4.4 algorithme EMCEE

```
# Paramètre du modèle et du module EMCEE
ndim = 2 + len(x) # Nombre de paramètre du modèle
nwalkers = 50 # Nombre de "walkers"
nburn = 10000 # periode de "burn-in"
nsteps = 15000 # Nombre d'étapes de l'algorithme
# Estimation pour l'initialisation des "walkers"
np.random.seed(0)
starting guesses = np.zeros((nwalkers, ndim))
starting_guesses[:, 0] = np.random.normal(-5, 10, (nwalkers))
starting guesses[:, 1] = np.random.normal(2, 5, (nwalkers))
starting guesses[:, 2:] = np.random.normal(0.5, 0.25, (nwalkers, ndim - 2))
# Fonctions principales EMCEE
import emcee
sampler = emcee.EnsembleSampler(nwalkers,ndim,log posterior,args=[x,y,sigma,100])
sampler.run mcmc(starting guesses, nsteps, progress = True)
#Mise en forme de l'échantillon "sample"
#Sample est une image de la distribution postérieur
```

```
sample = sampler.chain # shape = (nwalkers, nsteps, ndim)
sample = sampler.chain[:, nburn:, :].reshape(-1, ndim)
```

L'opération de marginalisation est cachée par le principe de l'algorithme. En effet, une des propriétés des chaines de Monte-Carlo est d'imager la distribution postérieur, et l'opération de marginalisation se fait simplement en ignorant les paramètres $\{g_i\}$.

sample est un tableau dont l'une des dimensions contient les paramètres du système : les deux premiers sont les coefficients a et b, tous les suivants sont les $\{g_i\}$.

```
# Marginalisation des paramètres de nuisance
a_sample = sample[:,1]
b_sample = sample[:,0]

# Tracé graphique
plt.plot(b_sample, a_sample, ',k', alpha=0.1)
plt.xlabel('Ordonnée à l'origine b')
plt.ylabel('Pente a');
```

Les données a et b issues de l'échantillonnage sont représentées en figure 4.8. Une zone centrée sur a=2 et b=0 ressort des données et correspond aux zones de crédibilité les plus élevées.

4.4.5 Élimination des données aberrantes

Le modèle sélectionne les valeurs de g_i minimisant l'erreur commise entre la droite moyenne et les données. Lorsque les g_i dépassent une valeur seuil g_0 arbitrairement fixée à 0,5, ces derniers ne participent plus à l'évaluation des coefficients a et b.

Cela signifie que les données aberrante possèdent un paramètre g_i inférieur à 0,5. Il est donc possible de mettre en évidence les valeurs aberrantes. Le graphique 4.9 reprend l'ensemble de l'analyse réalisée. Les données entourée en bleu sont celles détectées comme valeurs aberrantes par la méthode. Une faisceau de courbes représentant l'intervalle de crédibilité à 95% est ajouté. La droite servant de modèle initiale est bien inclue dans ce faisceau.

```
# Fonctions de tracé graphique
def plot_MCMC_model(ax, xdata, ydata, trace):
    """Plot the linear model and 2sigma contours"""
```

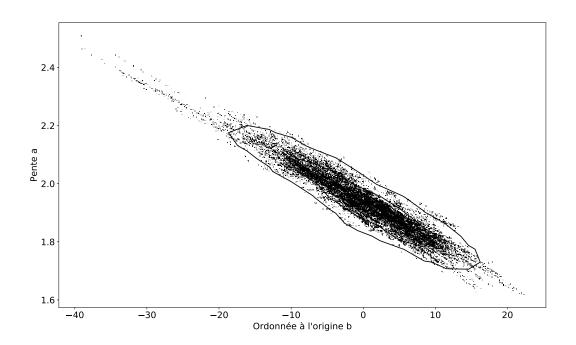


FIGURE 4.8 – Inférence de la zone la plus crédible pour les pentes a et ordonnées à l'origine b du modèle.

```
alpha, beta = trace[:2]
    xfit = np.linspace(-1, 100, 10)
    yfit = alpha[:, None] + beta[:, None] * xfit
    mu = yfit.mean(0)
    sig = 2 * yfit.std(0)

ax.plot(xfit, mu, "C1", label = "Ajustement par inférence bayésienne")
    ax.fill_between(xfit, mu - sig, mu + sig, color = 'C1', alpha=0.1,...
    label = r"Intervalle de crédibilité à $2\sigma$")#, color='lightgray')
    ax.set_xlabel('x')
    ax.set_ylabel('y')

# Retrait des données issues de la phase de "burn-in"
emcee_trace = sampler.chain[:, nburn:, :].reshape(-1, ndim).T

fig, ax = plt.subplots()
```

plot_MCMC_model(ax, x, y, emcee_trace)

L'intérêt de cette méthode est de pouvoir normaliser et rendre transparent le processus d'élimination des valeurs aberrantes. La richesse du formalisme d'analyse bayésienne rend cette opération possible. Bien que plus complexe à mettre en œuvre, une fois implémenté ces outils peuvent s'utiliser dans une grande variété de situations.

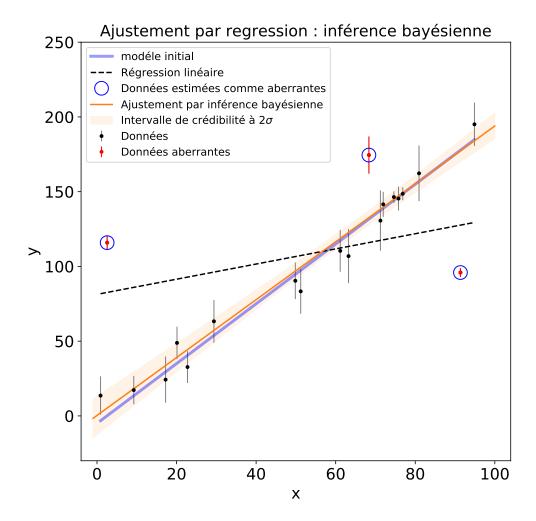


FIGURE 4.9 – Ajustement d'un modèle affine par inférence bayésienne. Des valeurs aberrantes sont ajoutées à un ensemble de données bruitées dont le modèle sous-jacent est une fonction affine. La méthode permet d'éliminer les valeurs aberrantes pour ne prendre en compte que les données valides contrairement à une régression linéaire simple sensible aux valeurs aberrantes.

4.5 Quelques mots pour conclure

Références:

- Nature, volume 506, issue 7487, 13 February 2014, "Statistical errors", R. Nuzzo
- Bayesian Reasonning in Data Analysis, G. D'Agostini

Je reviendrai simplement sur la différence de point de vu entre les traitements classiques et par inférences bayésiennes. Cette différence réside dans l'interprétation donnée dans l'analyse statistique d'un problème. D'un côté, nous nous intéressons à la probabilité ⁸ d'obtenir un jeu de données particulier moyennant la connaissance d'un modèle. D'un autre côté, nous déterminons le degrés de probabilité du modèle connaissant un jeu de données.

A P value measures whether an observed result can be attributed to chance. But it cannot answer a researcher's real question: what are the odds that a hypothesis is correct? Those odds depend on how strong the result was and, most importantly, on how plausibile the hypothesis is in the first place.

Ces deux approches sont différentes et ne répondent fondamentalement pas aux mêmes questions.

La difficulté réside dans le fait que la plupart du temps l'analyse de données conduit aux mêmes résultats chiffrés quelque soit la méthode employée. De ce fait, l'aspect utilitaire l'emporte : pourquoi faire compliqué?

L'approche bayésienne est complexe à mettre en œuvre auprès d'élèves ou étudiants et nécessite beaucoup de prérequis. Le cadre des travaux pratiques en temps limité ne permet souvent pas de réaliser l'analyse de données ou même de s'y arrêter quelques minutes alors qu'elle fait partie intégrante du travail expérimental.

Cependant, après ce modeste ⁹ tour des capacités d'analyse de l'approche bayésienne et des limites de certaines pratiques, j'ose espérer que l'analyse de données occupera une place plus importante, et qu'a défaut de rentrer dans les détails, le cadre d'application des méthodes d'analyses statistiques sera défini et le sens à donner à ces analyses sera introduit.

^{8.} Cette probabilité se résume souvent au fameux facteur p.

^{9.} Au vu de la littérature universitaire existant sur le sujet