Approximation au sens des moindres carrés

2.1 Introduction

On cherche à calculer les valeurs d'une fonction $f(x)$ pour toutes les valeurs de x mais on ne connaît pas explicitement f. Elle n'est connue qu'en certains points x_i expérimentaux. On remplace f par une fonction simple dont l'évaluation est aisée (ex : utilisation de polynômes, fonctions rationnelles, ...). A cet effet, on a vu dans le précédent chapitre la méthode d'interpolation, plus particulièrement l'interpolation polynômiale (approcher f par un polynôme $P_k(x)$ de degré k). Il existe aussi une autre approche différente de celle-ci, qui plutôt que d'imposer que $P_k(x) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j x^j$ et f coïncident en certains nœuds, elle demande qu'ils soient proches d'une manière plus globale. Plus explicitement, si on suppose qu'on possède des valeurs mesurées y_i pour $f(x_i)$ en n points x_i, $0 \leq i \leq n$ avec $(n > k)$, et on veut déterminer les valeurs $\alpha_j, \quad 0 \leq j \leq k$.

2.2 Approximation discrète au s.m.c

Soient $(n+1)$ points distincts (x_i, y_i), $i = 0, n$ et $m \geq 1$ un entier fixé. La méthode des moindres carrés consiste à chercher un polynome P_m^* de degré $\leq m$ qui vérifie :

$$\sum_{i=0}^{n} (y_i - P_m^*(x_i))^2 \leq \sum_{i=0}^{n} (y_i - P_m(x_i))^2 \tag{2.1}$$

Ceci pour tout polynôme P_m de degré $\leq m$.

L'inégalité (2.1) signifie qu'on cherche un polynôme P_m^* de degré $\leq m$ qui réalise la plus petite distance aux points (x_i, y_i)

Cas particulier : m=1

Dans ce cas on cherche un polynôme P_1^* de degré ≤ 1 qui vérifie :

$$\sum_{i=0}^{n}(y_i - P_1^*(x_i))^2 \leq \sum_{i=0}^{n}(y_i - P_1(x_i))^2$$

Pour tout polynôme de degré 1 nous avons : $P_1^*(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$ et $P_1(x) = a_0 + a_1 x$.

On cherche donc α_0 et α_1 tels que :

$$\sum_{i=0}^{n}(y_i - (\alpha_0 + \alpha_1 x))^2 \leq \sum_{i=0}^{n}(y_i - (a_0 + a_1 x))^2 \tag{2.2}$$

Il suffit donc de trouver le minimum de la fonction $f(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^{n}\left(f(x_i) - (a_0 + a_1 x_i)\right)^2$.

$$\begin{aligned}
(2.2) &\iff \min_{a_0,a_1} \underbrace{\sum_{i=0}^{n}\left(f(x_i) - (a_0 + a_1 x_i)\right)^2}_{f(a_0,a_1)} \\
&\iff \min_{a_0,a_1} \sum_{i=0}^{n}\left(f(x_i)^2 - 2f(x_i)(a_0 + a_1 x_i) + (a_0 + a_1 x_i)^2\right) \\
&\iff \min_{a_0,a_1} \left(\sum_{i=0}^{n} f(x_i)^2 - 2\sum_{i=0}^{n} f(x_i)(a_0 + a_1 x_i) + \sum_{i=0}^{n}(a_0 + a_1 x_i)^2\right)
\end{aligned}$$

Une méthode pour trouver les coefficients α est de trouver le minimum de la fonction $f(a_0, a_1)$ ($f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$) est atteint quand $\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial a_0} = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial a_1} = 0 \end{cases}$

Or $\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial a_0} = -2\displaystyle\sum_{i=0}^{n} f(x_i) + 2\sum_{i=0}^{4}(\alpha_0 + \alpha_1 x_i) = 0 \\ \dfrac{\partial f}{\partial a_1} = -2\displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i f(x_i) + 2\sum_{i=0}^{n} x_i(\alpha_0 + \alpha_1 x_i) = 0 \end{cases}$

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{i=0}^{n}(\alpha_0 + \alpha_1 x_i) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{n}x_i(\alpha_0 + \alpha_1 x_i) = \sum_{i=0}^{n} x_i f(x_i) \end{cases} \iff \begin{cases} \displaystyle(\sum_{i=0}^{n} 1)\alpha_0 + \sum_{i=0}^{n} x_i\alpha_1 = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \\ \displaystyle(\sum_{i=0}^{n} x_i)\alpha_0 + \sum_{i=0}^{n} {x_i}^2\alpha_1 = \sum_{i=0}^{n} x_i f(x_i) \end{cases}$$

D'où l'on a l'écriture matricielle :

$$(2.2) \iff \begin{pmatrix} \displaystyle\sum_{i=0}^{n} 1 & \displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i & \displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \displaystyle\sum_{i=0}^{n} f(x_i) \\ \displaystyle\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, x_i \end{pmatrix}$$

Cas général : m quelconque

Dans le cas général on est amené à résoudre le systéme linéaire $(m+1) \times (m+1)$ suivant :

$$\begin{cases} \alpha_0(\sum_{i=0}^{n} 1) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} x_i + \cdots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} x_i^m = & \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \\ \alpha_0(\sum_{i=0}^{n} x_i) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} {x_i}^2 + \cdots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} = & \sum_{i=0}^{n} x_i f(x_i) \\ \vdots & \\ \alpha_0(\sum_{i=0}^{n} x_i^m) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} {x_i}^{m+1} + \cdots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} x_i^{2m} = & \sum_{i=0}^{n} x_i^m f(x_i) \end{cases} \tag{2.3}$$

D'où l'on a l'écriture matricielle :

$$(2.3) \Longleftrightarrow \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} 1 & \sum_{i=0}^{n} x_i & \cdots & \sum_{i=0}^{n} x_i^m \\ \sum_{i=0}^{n} x_i & \sum_{i=0}^{n} x_i^2 & \cdots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} \\ \vdots & & & \\ \sum_{i=0}^{n} x_i^m & \sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1} & \cdots & \sum_{i=0}^{n} x_i^{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \vdots \\ \alpha_m^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \\ \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, x_i \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, x_i^m \end{pmatrix}$$

Remarque : le cas où $m = n$

Pour ce cas on remarque que la relation 2.1 est satisfaite lorsque $P_m^* = P_n^*$ est un polynôme d'interpolation aux points $(x_i, f(x_i))$.

Comme on a $P_n^*(x_i) = f(x_i)$ pour $i = 0, \cdots, n$ alors l'équation 2.1 devient

$$0 \leq \sum_{i=0}^{n} [y_i - P_m(x_i)]^2.$$

Théorème 2.2.1. *Lorsque $m = n$ le polynôme des moindres carré P_m^* coïncide avec le polynôme d'interpolation aux points $(x_i, f(x_i))$ pour $i = 0, \cdots, n$.*

2.2.1 Exemple

On considère la fonction f définie sur $[-2, 2]$, par le tableau de valeurs :

x_i	-2	-1	0	1	2
$f(x_i)$	2	1	0	1	2

1. Déterminer la meilleure approximation $P^*(x) = \sum_{j=0}^{2} \alpha_j^* x^j$, de degré deux, au s.m.c de f.

Solution :

1. Cela revient à minimiser la quantité :

$$E = \sum_{i=0}^{5} \left[f\left(x_i\right) - \left(\alpha_0 + \alpha_1 x_i + \alpha_2 x_i^2\right) \right]^2$$

par rapport aux coefficients α_i. C'est à dire

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_0} = \frac{\partial E}{\partial \alpha_1} = \frac{\partial E}{\partial \alpha_2} = 0$$

D'après ce qui précède la meilleure approximation de degré 2 de la fonction f au sens des moindres carrés aux points x_0, x_1, x_2, x_3, x_4 pour $i = 0, 1, 2, 3, 4$.
Alors, les coefficients $\alpha^* = (\alpha_0^*, \alpha_1^*, \alpha_2^*)$ de P^* constituent l'unique solution du système $A\alpha = b$ ce qui conduit à la résolution du système

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{4} 1 & \sum_{i=0}^{4} x_i & \sum_{i=0}^{3} x_i^2 \\ \sum_{i=0}^{4} x_i & \sum_{i=0}^{4} x_i^2 & \sum_{i=0}^{3} x_i^3 \\ \sum_{i=0}^{4} x_i^2 & \sum_{i=0}^{4} x_i^3 & \sum_{i=0}^{3} x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{4} f(x_i) \\ \sum_{i=0}^{4} f(x_i) x_i \\ \sum_{i=0}^{4} f(x_i) x_i^2 \end{pmatrix}$$

ce qui se traduit numériquement :

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \\ 18 \end{pmatrix}$$

Ce qui donne les valeurs de la solution.

$$\begin{cases} \alpha_0^* = \frac{12}{35} \\ \alpha_1^* = 0 \\ \alpha_3^* = \frac{3}{7} \end{cases}$$

Et donc

$$P^*\left(x\right) = \frac{3}{7} x^2 + \frac{12}{35}$$

2.3 Approximation continue au s.m.c (ou en moyenne quadratique)

La méthode des moindres carrés dans le cas continue consiste à chercher un polynome P_m^* de degré $\leq m$ sur l'intervalle $[a, b]$qui vérifie :

$$\int_a^b (y_i - P_m^*(x_i))^2 \leq \int_a^b (y_i - P_m(x_i))^2 \tag{2.4}$$

En utilisant le même principe que dans le cas discret on peut affirmer que le meilleur approximant au s.m.c de la fonction $f \in E$ s'écrit $P^*(x) = \sum_{i=0}^{k} \alpha_i^* x^i$ où $(\alpha_0^*, \alpha_1^*, \ldots, \alpha_k^*)$ est l'unique solution du système matriciel :

$$\begin{pmatrix} \int_a^b dx & \int_a^b xdx & \cdots & \cdots & \int_a^b x^k dx \\ \int_a^b xdx & \int_a^b x^2 dx & \cdots & \cdots & \int_a^b x^{k+1} dx \\ \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \vdots \\ \int_a^b x^k dx & \int_a^b x^{k+1} dx & \cdots & \cdots & \int_a^b x^{2k} dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \vdots \\ \alpha_k^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_a^b f(x)\, dx \\ \int_a^b x f(x)\, dx \\ \vdots \\ \int_a^b x^k f(x)\, dx \end{pmatrix}$$

2.3.1 Exemple

Déterminer le polynôme $P^*(x)$ de meilleure approximation au s.m.c s de $f(x) = P_3(x) = x^3 - 6x^2 - x + 30$ pour $x \in [-1, 1]$.

Solution :

On pose $P^*(x) = \alpha_0^* + \alpha_1^* x + \alpha_2^* x^2$, il suffit de résoudre d'écrire le système comme suit :

$$\begin{pmatrix} \int_{-1}^1 dx & \int_{-1}^1 xdx & \int_{-1}^1 x^2 dx \\ \int_{-1}^1 xdx & \int_{-1}^1 x^2 dx & \int_{-1}^1 x^3 dx \\ \int_{-1}^1 x^2 dx & \int_{-1}^1 x^3 dx & \int_{-1}^1 x^4 dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_{-1}^1 f(x)\, dx \\ \int_{-1}^1 x f(x)\, dx \\ \int_{-1}^1 x^2 f(x)\, dx \end{pmatrix}$$

après calcul on obtient le système :

$$\begin{cases} 56 & = & 2\alpha_0^* + \frac{2}{3}\alpha_2^* \\ -\frac{4}{15} & = & \frac{2}{3}\alpha_1^* \\ \frac{88}{5} & = & \frac{2}{3}\alpha_0^* + \frac{2}{5}\alpha_2^* \end{cases}$$

ou encore

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & \frac{2}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^* \\ \alpha_1^* \\ \alpha_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 56 \\ -\frac{4}{15} \\ \frac{88}{5} \end{pmatrix}$$

La solution est $\alpha_0^* = 30, \alpha_1^* = -\frac{2}{5}$ et $\alpha_2^* = -6$,

D'où

$$P^*(x) = -6x^2 - \frac{2}{5}x + 30$$