Chapitre 4
La Méthode des moindres carrées

Dans la théorie de l'approximation, deux types de problèmes se posent dans le traitement des données tabulaires.

– Le premier problème consiste à trouver une fonction qui passe par tous les points du tableau (interpolation)

– Le deuxième consiste à chercher la meilleure fonction qui peut être utilisée pour représenter les données, même si ça ne passe pas par tous les points, ce problème est connue sous le nom de 'ajustement de courbe',('identification de modèle')

L'interpolation polynomiale est utilisée pour approcher une fonction f dont les valeurs (du tableau) sont connues avec précision.

Souvent, cependant, les données tabulaires ne sont connues qu'approximativement. Plus précisément, dans la plupart des cas, les données sont fournies par un ensemble de mesures comportant des erreurs expérimentales. Ainsi, l'interpolation, dans ce cas a peu d'intérêt, voire dangereux.

I-Position du problème

Considérons le tableau suivant :

x	x_1	x_2	x_3	----	x_n
y	y_1	y_2	y_3	----	y_n

(1)

On suppose qu'on est parvenu à déterminer la forme d'une fonction $y = f(x)$ qui approche le mieux les données. La méthode des moindres consiste à déterminer $f(x)$ qui minimise la somme des carrés des erreurs.

Si yi représente l'observation expérimentale (tableau) et $f(xi)$ la valeur calculée par la fonction f (théorique) alors $e_i = (y_i - f(x_i))$. La méthode des moindres carrés consiste à déterminer f telle que :

$$e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 + \cdots + e_n^2 = \left(y_1 - f(x_1)\right)^2 + \left(y_2 - f(x_2)\right)^2 + \cdots + \left(y_n - f(x_n)\right)^2, (I-1)$$

soit minimale.

II- Régression linéaire

On considère les données représentées dans le tableau (1).

On suppose que y vérifie $y = f(x) = ax + b$ (I-2))

On cherche à déterminer a et b. D'après l'équation (I-1), le problème des moindres carrés se formulera.

$$\min_{a,b}\left((ax_i + b) - y_i\right)^2$$

On doit avoir alors :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial a}\left(\sum_{i=1}^{n}\left((ax_i+b)-y_i\right)^2 = 2\sum_{i=1}^{n}[(ax_i+b)-y_i](x_i) = 0\right) \\ \dfrac{\partial}{\partial b}\left(\sum_{i=1}^{n}\left((ax_i+b)-y_i\right)^2 = 2\sum_{i=1}^{n}[(ax_i+b)-y_i] = 0\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}[(ax_i+b)-y_i](x_i) = 0 \\ \sum_{i=1}^{n}[(ax_i+b)-y_i] = 0 \end{cases}$$

On trouve :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n}[(ax_i+b)-y_i](x_i) = 0 = \sum_{i=1}^{n}ax_i^2 + \sum_{i=1}^{n}bx_i - \sum_{i=1}^{n}y_ix_i \\ \sum_{i=1}^{n}[(ax_i+b)-y_i] = 0 = \sum_{i=1}^{n}ax_i + \sum_{i=1}^{n}b - \sum_{i=1}^{n}y_i \end{cases}$$

$$\sum_{i=1}^{n}ax_i^2 + \sum_{i=1}^{n}bx_i - \sum_{i=1}^{n}y_ix_i = a\sum_{i=1}^{n}x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n}x_i - \sum_{i=1}^{n}y_ix_i = 0$$

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

$$\begin{cases} a\sum_{i=1}^{n}x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n}x_i = \sum_{i=1}^{n}y_ix_i \\ a\sum_{i=1}^{n}x_i + nb = \sum_{i=1}^{n}y_i \end{cases}$$

$$\underline{a =}$$

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

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

Exemple :

Soit les données suivantes

x	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4
y	25	31	27	28	36	35	32

Déterminer la fonction linéaire qui représente le mieux les données du tableau.

x	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	**17,5**
y	25	31	27	28	36	35	32	**214**
x^2	1	2,25	4	6,25	9	12,25	16	**50,75**
y^2	625	961	729	784	1296	1225	1024	**6644**
xy	25	46,5	54	70	108	122,5	128	**554**

$$\begin{cases} a = \dfrac{7 * 554 - 17,5 * 214}{7 * 50,75 - (17,5)^2} = 2,71 \\ b = \dfrac{(50,75) * 214 - 17,5 * 554}{7 * (50,75) - (17,5)\text{^}2} = 23,7857 \end{cases}$$

Alors la droite des moindres carrées est : **y = 2,71x +23,7857**

III- Ajustement polynômiale

On suppose cette fois ci que la fonction f qui représente le mieux les données est Polynomiale.

$$\boldsymbol{f(x) = P_m(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k x^k = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_m x^m}$$

Selon le principe des moindres carrés, on cherche $\boldsymbol{a_0}$, $\boldsymbol{a_1}, \dots, \boldsymbol{a_m}$ qui minimise

$$E(\boldsymbol{a_0}, \boldsymbol{a_1}, \dots, \boldsymbol{a_m}) = \sum_{i=1}^{n} [P_m(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[\sum_{\boldsymbol{k=0}}^{\boldsymbol{m}} \boldsymbol{a_k x^k} - y_i \right]^2 \quad (III-1)$$

E est minimal si :

$\frac{\partial}{\partial a_j} E(\boldsymbol{a_0}, \boldsymbol{a_1}, \dots, \boldsymbol{a_m}) = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{j} = \boldsymbol{1}, \dots, \boldsymbol{m}$ (III-2)

$$\frac{\partial}{\partial a_0} E = \sum_{i=1}^{n} 2 \left[\sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{a_k x^k} - y_i \right] = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_1} E = \sum_{i=1}^{n} 2 \left[\sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{a_k x^k} - y_i \right] (x_i) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_m} E = \sum_{i=1}^{n} 2 \left[\sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{a_k x^k} - y_i \right] (x_i^m) = 0$$