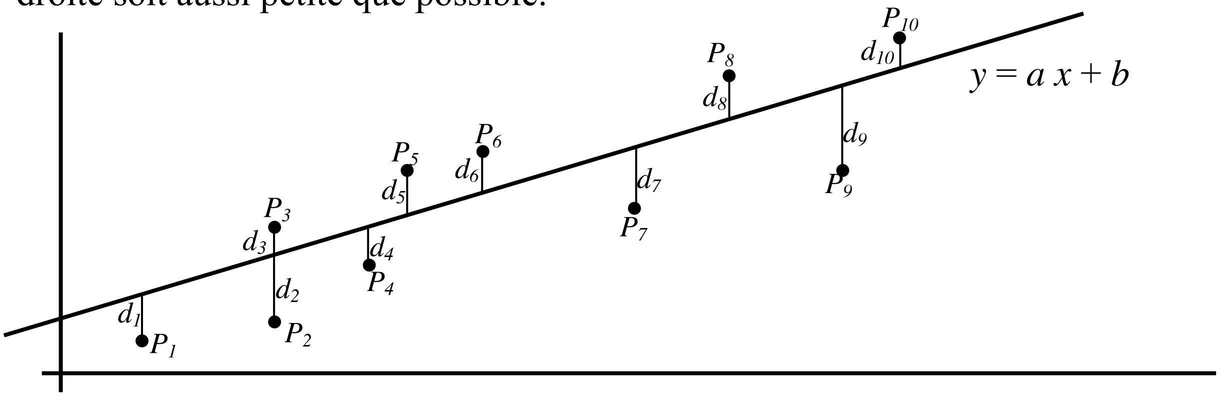
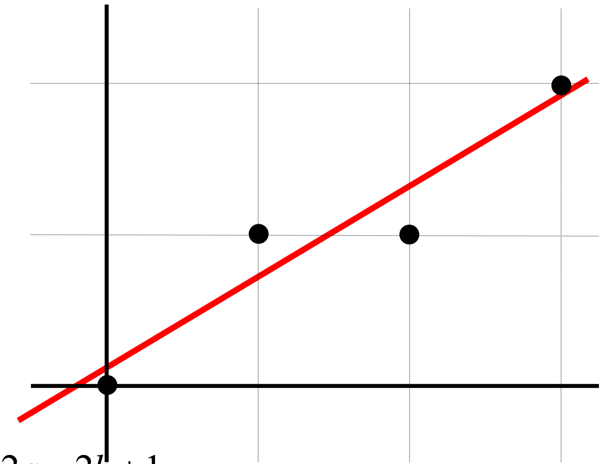
§ 4 Méthode des moindres carrés

Étant donné une liste de points du plan $P_1(x_1;y_1)$, $P_2(x_2;y_2)$, $P_3(x_3;y_3)$, …, $P_n(x_n;y_n)$, on cherche une droite d'équation $y = a\,x + b$ qui approche (au mieux) ces n points.

La méthode des moindres carrés consiste à choisir la droite dont la somme des carrés des écarts (distance prise verticalement) entre les points donnés et la droite soit aussi petite que possible.



Exemple



Cherchons la droite $y = ax + b$ qui approche le mieux, au sens des moindres carrés, les points $A(0;0)$, $B(1;1)$, $C(2;1)$ et $D(3;2)$.

Calculons les *carrés des écarts*

$$d_1^{\,2} = (a\cdot 0 + b - 0)^2 = b^2,$$
$$d_2^{\,2} = (a\cdot 1 + b - 1)^2 = a^2 + b^2 + 2ab - 2a - 2b + 1,$$
$$d_3^{\,2} = (a\cdot 2 + b - 1)^2 = 4a^2 + b^2 + 4ab - 4a - 2b + 1,$$
$$d_4^{\,2} = (a\cdot 3 + b - 2)^2 = 9a^2 + b^2 + 6ab - 12a - 4b + 4,$$

puis la somme E de ces *carrés des écarts*

$$E = d_1^{\,2} + d_2^{\,2} + d_3^{\,2} + d_4^{\,2} = 14a^2 + 4b^2 + 12ab - 18a - 8b + 6.$$

Il faut trouver les valeurs de a et b de sorte que E soit minimal.
E est une fonction de a, elle atteint son minimum lorsque $E'(a)=0$, mais E est également une fonction de b qui atteint son minimum lorsque $E'(b)=0$.

$$E'(a) = 28a + 12b - 18$$
$$E'(b) = 12a + 8b - 8$$
$$\begin{cases} 28a + 12b - 18 = 0 \\ 12a + 8b - 8 = 0 \end{cases} \Rightarrow\ a = \frac{3}{5},\ b = \frac{1}{10}$$

L'équation de la droite des moindres carrés cherchée est $y = \frac{3}{5}x + \frac{1}{10}$

De façon générale, il s'agit donc de choisir les coefficients a et b de façon à minimiser l'expression

$$E = d_1^{\,2} + d_2^{\,2} + \cdots + d_n^{\,2} = \sum_{k=1}^{n} d_k^{\,2} = \sum_{k=1}^{n} ((y_k - (ax_k + b))^2 = \sum_{k=1}^{n} (y_k - ax_k - b)^2$$

On peut considérer E comme une fonction dont la variable est b :

$$E(b) = \sum_{k=1}^{n} (y_k - ax_k - b)^2$$

Cette fonction est un polynôme de 2[me] degrés, elle admet un minimum pour la valeur de b qui annule la dérivée $E'(b)$

$$E'(b) = \sum_{k=1}^{n} 2(y_k - ax_k - b)\cdot(-1) = -2\sum_{k=1}^{n} (y_k - ax_k - b) = -2\sum_{k=1}^{n} y_k + 2\sum_{k=1}^{n} ax_k + \underbrace{2\sum_{k=1}^{n} b}_{2nb}$$

En posant $E'(b) = 0$, on obtient l'équation

$$2\sum_{k=1}^{n} y_k - 2\sum_{k=1}^{n} ax_k - 2nb = 0 \quad \Rightarrow \quad b = \frac{\sum_{k=1}^{n} y_k - \sum_{k=1}^{n} ax_k}{n} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} y_k - a\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k = \overline{y} - a\overline{x}$$

où $\overline{x}$ est la moyenne des x_k et $\overline{y}$ est la moyenne des y_k.

On peut également considérer E comme une fonction dont la variable est a

$$E(a) = \sum_{k=1}^{n} (y_k - ax_k - b)^2$$

Cette fonction admet un minimum pour la valeur de a qui annule la dérivée $E'(a)$.

$$\begin{aligned}
E'(a) &= \sum_{k=1}^{n} 2(y_k - ax_k - b)(-x_k) = -2\sum_{k=1}^{n} (x_k y_k - ax_k^{\,2} - bx_k) \\
&= -2\left(\sum_{k=1}^{n} x_k y_k - a\sum_{k=1}^{n} x_k^{\,2} - \sum_{k=1}^{n} bx_k \right) \\
&= -2\left(\sum_{k=1}^{n} x_k y_k - a\sum_{k=1}^{n} x_k^{\,2} - \sum_{k=1}^{n} (\overline{y} - a\overline{x})x_k \right) \\
&= -2\left(\sum_{k=1}^{n} x_k y_k - a\sum_{k=1}^{n} x_k^{\,2} - \sum_{k=1}^{n} x_k \overline{y} + a\sum_{k=1}^{n} \overline{x}x_k \right) \\
&= -2\left(\sum_{k=1}^{n} (y_k - \overline{y})x_k - a\sum_{k=1}^{n} (x_k - \overline{x})x_k \right)
\end{aligned}$$

En posant $E'(a) = 0$, on obtient l'équation

$$\sum_{k=1}^{n}(y_k - \overline{y}) \cdot x_k - a\sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x}) \cdot x_k = 0$$

D'où l'on tire la valeur de a.

$$a = \frac{\sum_{k=1}^{n}(y_k - \overline{y}) \cdot x_k}{\sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x}) \cdot x_k}$$

Conclusion

Étant donné n points du plan $P_1(x_1;y_1)$, $P_2(x_2;y_2)$, $P_3(x_3;y_3)$, … , $P_n(x_n;y_n)$, l'équation de la droite des moindres carrés est : $y = a\,x + b$

avec

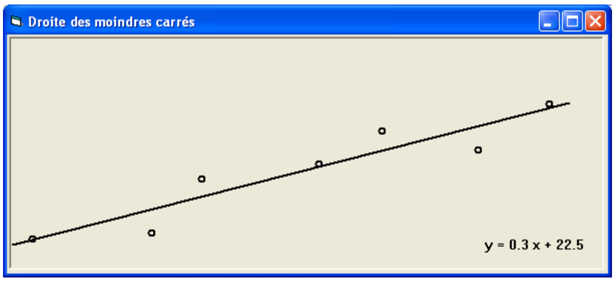
$$a = \frac{\sum_{k=1}^{n}(y_k - \overline{y}) \cdot x_k}{\sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x}) \cdot x_k} \quad \text{et} \quad b = \overline{y} - a\overline{x} \quad \text{où} \quad \overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k \quad \text{et} \quad \overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} y_k$$

On peut montrer que a peut également s'écrire

$$a = \frac{\sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x}) \cdot y_k}{\sum_{k=1}^{n}(x_k - \overline{x})^2} \quad \text{ou} \quad a = \frac{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k y_k \; - \overline{x}\;\overline{y}}{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} {x_k}^2 \; - \overline{x}^2}$$

Exercice 10

Écrire un programme qui trace la droite des moindres carrés pour des points donnés avec la souris.



Exercice 11

On donne les valeurs ci–contre

x	1	3	4	6	8	9	11	14
y	1	2	4	4	5	7	8	9

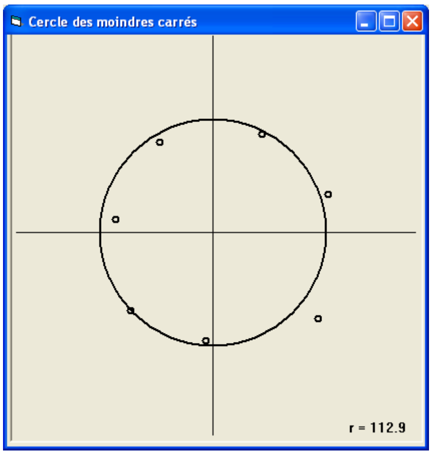
a) Calculer la droite des moindres carrés.

b) Calculer la droite des moindres carrés après avoir inversé les rôles de x et y.

c) Dessiner ces 2 droites dans le même système d'axes.

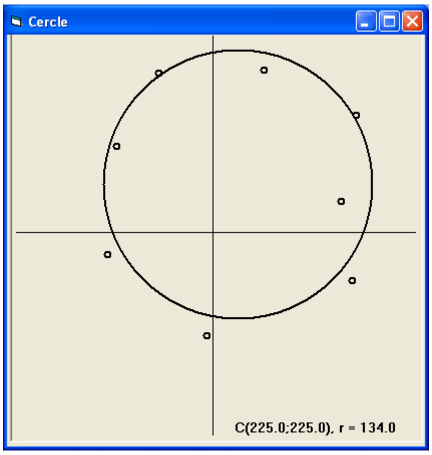
Exercice 12

Écrire un programme qui trace un cercle centré à l'origine et qui approche, au sens des moindres carrés, des points donnés avec la souris.



Étant donnée n points du plan, $(x_1;y_1)$, …, (x_n,y_n), le problème revient à trouver un rayon r de sorte que $E(r) = \sum_{k=1}^{n} \left(\sqrt{x_k^{\,2} + y_k^{\,2}} - r \right)^2$ soit minimal.

Trouver, par la méthode des moindres carrés, le centre et le rayon d'un cercle qui *approche n* points donnés est difficile. Une autre méthode consiste à choisir comme centre du cercle le point $(x_c;y_c)$ où x_c est la moyenne des abscisses des points données et y_c la moyenne des ordonnées des points donnés.



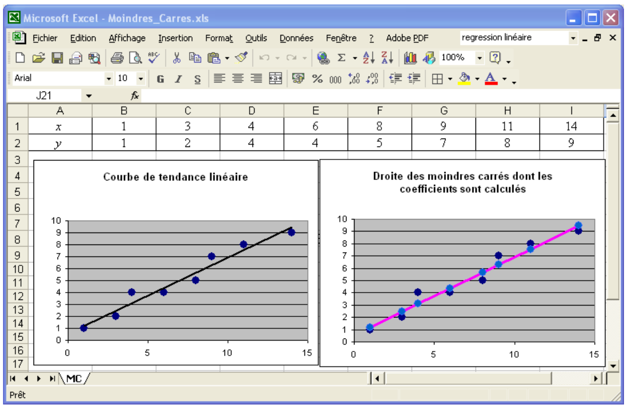
En suivant cette méthode, écrire un programme qui trace un cercle qui approche des points donnés avec la souris.

Exercice 13

Trouver une parabole qui approche au mieux (au sens des moindres carrés) les points $A(-1;0)$, $B(0;1)$, $C(1;1)$ et $D(2;-1)$.

Exercice 14

Dans *Excel*, le dessin d'une droite des *moindres carrés* peut se faire automatiquement en ajoutant une *courbe de tendance de type linéaire* à un graphique.



Avec les données de l'exercice 11, afficher une courbe de tendance linéaire, calculer ensuite les coefficients a et b de la droite des moindres carrés $y = a\,x + b$, puis représenter cette droite.

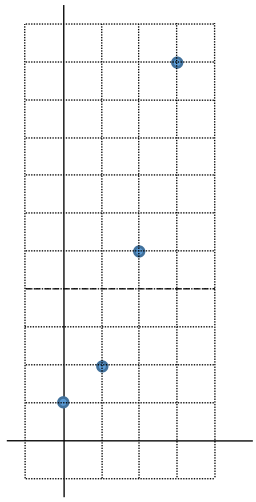
AdM3 – Moindres carrés

Exercice 12

1) cx=0, cy=0, r=moyenne des distances
2) cx=xbar, cy=ybar, r=moyenne des distances
3) « **Balayage** » :
   Déterminer le meilleur cercle passant par un nuage de points en minimisant E(cx,cy,r).
   On considère pour cela tous les centres (cx;cy) possibles : on « balaie » la zone « picture » et calcule pour chaque centre le meilleur rayon ainsi que la valeur de E. Finalement on choisit le centre tel que E soit minimal.
   REMARQUE : si le centre du meilleur cercle est en dehors de la zone graphique on ne l'obtient pas avec ce balayage… il faudrait alors étendre le balayage ! Mais… jusqu'où ?

Exercice 15

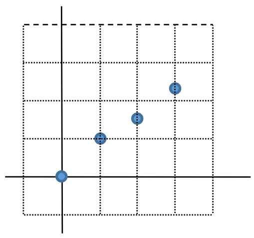
Pour cet exercice il sera nécessaire d'utiliser Mathematica pour résoudre des équations.



On donne les points $A(0;1), B(1;2), C(2;5)$ et $D(3;10)$.

a) Trouver la valeur de a, de sorte que la fonction $y = a^x$ approche le mieux ces 4 points au sens des moindres carrés.

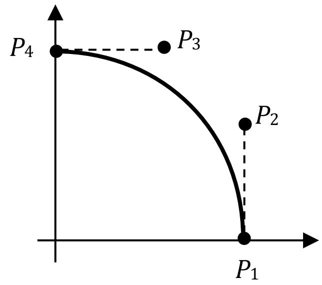
b) En remarquant que $\ln(a^x) = x \cdot \ln(a)$, on peut "linéariser" le problème en considérant les points $A'(0;\ln(1)), B'(1;\ln(2)), C'(2;\ln(5))$ et $D'(3;\ln(10)$ et en cherchant une fonction $y = \ln(a) \cdot x$.
Trouver la valeur de $\tilde{a}$ de sorte que la fonction $y = \tilde{a} \cdot x$ approche le mieux les 4 points A', B', C' et D' au sens des moindres carrés, puis comparer les valeurs de a et $e^{\tilde{a}}$.



c) Trouver les valeurs de a et b, de sorte que la fonction $y = a \cdot b^x$ approche le mieux les 4 points A, B, C et D au sens des moindres carrés.

d) "Linéariser" la question c).

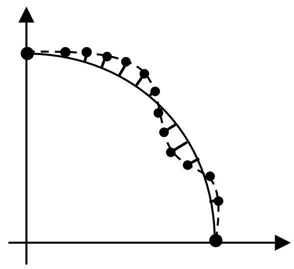
Exercice 16



On souhaite approcher le quart de cercle de rayon 1 centré à l'origine par un arc de Bézier dont les points de contrôle sont P_1, P_2, P_3 et P_4 avec $P_1(1;0)$ et $P_4(0;1)$. Pour que l'arc de Bézier ressemble à un arc de cercle, on choisit $P_2(1;k)$ et $P_3(k;1)$.

Il s'agit de trouver une valeur de k en appliquant une méthode des *moindres carrés* de sorte que l'arc

1) Dire pourquoi la distance entre un point $P(x;y)$ et l'arc de cercle est donnée par $d = \left|\sqrt{x^2 + y^2} - 1\right|$.



2) On prend 101 points ($t = 0$, $t = 1/100$, $t = 2/100$, … , $t = 1$) de l'arc de Bézier défini par $P_1(1;0)$, $P_2(1;k)$, $P_3(k;1)$ et $P_4(0;1)$ et on cherche la valeur de k pour laquelle la somme des carrés des distances entre ces 101 points et l'arc de cercle est minimale.

   Écrire un programme qui calcule ces sommes, pour k variant entre 0,4 et 0,6, et qui affiche la valeur de k, au millième près, correspondant à la plus petite de ces sommes.