Ajustement affine par la méthode des moindres carrés

Théorème et définition

Soit $(x;y)$ une série statistique double représentée dans un repère $(o;\vec{i};\vec{j})$ du plan par un nuage de n points $A_i(x_i;y_i)$ avec $i = 1,2, \ldots ,n$.

On suppose que les réels x_i ne sont pas tous égaux.

Alors, il existe une unique droite **D** d'équation $y = ax + b$ telle que la somme **S** = $\sum_{i=1}^{n}\left[y_i - (ax_i + b)\right]^2$ soit minimale.

D , appelée la droite de régression de y en x, est la droite passant par le point moyen du nuage et de coefficient directeur $a = \dfrac{s_{xy}}{s_x^{\,2}}$.

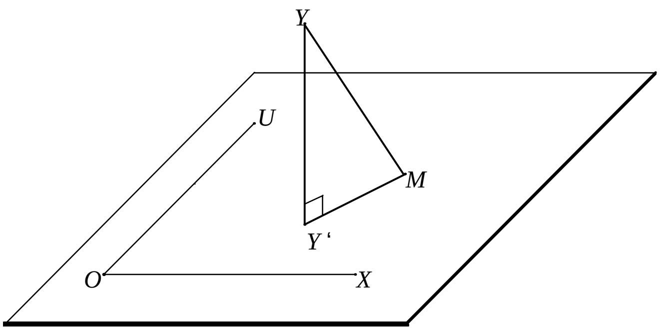
Démonstration dans le cas d'un nuage de trois points (n=3).

Dans l'espace rapporté à un repère orthonormal $\left(O;\vec{e}_1;\vec{e}_2;\vec{e}_3\right)$, on considère les points définis par leurs coordonnées : $X(x_1;x_2;x_3)$, $Y(y_1;y_2;y_3)$ et $U(1;1;1)$.

On peut remarquer que dans le cas d'un nuage de n points, le raisonnement s'effectuerait en dimension n.

Les réels x_i n'étant pas tous égaux, les vecteurs $\overrightarrow{OX}$ et $\overrightarrow{OU}$ ne sont pas colinéaires.

La recherche de a et b revient à celle d'un point $M(ax_1 + b;ax_2 + b;ax_3 + b)$ de l'espace tel que la somme **S** des résidus quadratiques est minimale.



Or, $\overrightarrow{OM} = a\ \overrightarrow{OX} + b\ \overrightarrow{OU}$, donc le point M appartient au plan (OUX).

D'autre part, **S** = $\sum_{i=1}^{n}\left[y_i - (ax_i + b)\right]^2$, donc **S** = YM^2, donc, en notant Y' le projeté orthogonal de Y sur le plan (OUX) et en utilisant le théorème de Pythagore dans le triangle rectangle YMY', **S** = $YY'^2 + MY'^2$.

Donc **S** est minimale pour $M = Y'$ et son minimum est YY'^2.

En conclusion, il existe bien un unique couple $(a;b)$ rendant **S** minimale : c'est le couple des coordonnées du point Y' dans le repère (O ; $\overrightarrow{OX}$; $\overrightarrow{OU}$) puisque $\overrightarrow{OY'} = a\ \overrightarrow{OX} + b\ \overrightarrow{OU}$ (relation **1**).

Calcul de a et b.

En utilisant la relation **1**, on va calculer de deux façons différentes les produits scalaires $\overrightarrow{OY'} \bullet \overrightarrow{OU}$ puis $\overrightarrow{OY'} \bullet \overrightarrow{OX}$.

On a $\overrightarrow{OY'} \bullet \overrightarrow{OU} = (\overrightarrow{OY} + \overrightarrow{YY'}) \bullet \overrightarrow{OU}$

$= \overrightarrow{OY} \bullet \overrightarrow{OU} + \overrightarrow{YY'} \bullet \overrightarrow{OU}$.

$= \overrightarrow{OY} \bullet \overrightarrow{OU}$ (les vecteurs $\overrightarrow{YY'}$ et $\overrightarrow{OU}$ sont orthogonaux)

$= \sum_{i=1}^{n} y_i$

D'autre part,

$\overrightarrow{OY'} \bullet \overrightarrow{OU} = (a\ \overrightarrow{OX} + b\ \overrightarrow{OU}) \bullet \overrightarrow{OU}$

$= a\ \overrightarrow{OX} \bullet \overrightarrow{OU} + b\ \overrightarrow{OU}^{\,2}$

$= a\sum_{i=1}^{n} x_i + b\,n.$

On peut alors en déduire l'égalité $\sum_{i=1}^{n} y_i = a\sum_{i=1}^{n} x_i + b\ n$, donc, en multipliant par $\dfrac{1}{n}$, la relation **2** : $\overline{y} = a\,\overline{x} + b$.

De même,

$$\begin{aligned}\overrightarrow{OY'} \bullet \overrightarrow{OX} &= (\overrightarrow{OY} + \overrightarrow{YY'}) \bullet \overrightarrow{OX}\\ &= \overrightarrow{OY} \bullet \overrightarrow{OX} + \overrightarrow{YY'} \bullet \overrightarrow{OX}\\ &= \overrightarrow{OY} \bullet \overrightarrow{OX}\\ &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i ,\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\overrightarrow{OY'} \bullet \overrightarrow{OX} &= (a\ \overrightarrow{OX} + b\ \overrightarrow{OU}) \bullet \overrightarrow{OX}\\ &= \mathrm{a}\ \overrightarrow{OX}^2 + \mathrm{b}\ \overrightarrow{OU} \bullet \overrightarrow{OX}\\ &= \mathrm{a} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \mathrm{b} \sum_{i=1}^{n} x_i\end{aligned}$$

On peut alors en déduire l'égalité $\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = \mathrm{a} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \mathrm{b} \sum_{i=1}^{n} x_i$,

donc, en multipliant par $\frac{1}{n}$, $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = \frac{a}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \mathrm{b}\,\bar{x}$,

Donc, en tenant compte de la relation **2**, $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = \frac{a}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + (\bar{y} - a\,\bar{x})\,\bar{x}$,

donc, $a = \dfrac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \bar{x}\,\bar{y}}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \bar{x}^2}$

En conclusion, $a = \dfrac{s_{xy}}{s_x^{\ 2}}$.

<u>Mesure de la pertinence de l'ajustement</u>.

On note H et K les projetés orthogonaux respectifs de X et Y' sur la droite (OU).

Les triplets de coordonnées de H et K dans le repère $(O; \vec{e}_1; \vec{e}_2; \vec{e}_3)$ sont respectivement $(\bar{x}; \bar{x}; \bar{x})$ et $(\bar{y}; \bar{y}; \bar{y})$.

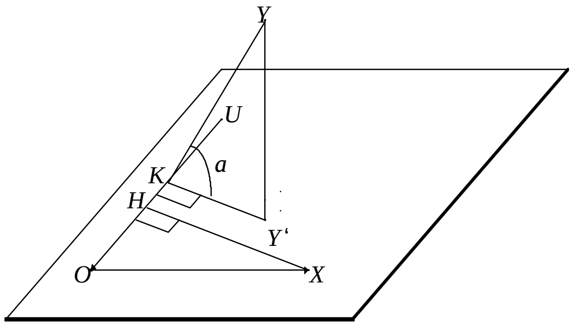
Or, $\overrightarrow{HX} \bullet \overrightarrow{KY} = \|\overrightarrow{HX}\|\ \|\overrightarrow{KY}\|\ \cos(\overrightarrow{HX}\ ;\ \overrightarrow{KY})$,

donc, $\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}\ \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2}\ \cos(\overrightarrow{HX}\ ;\ \overrightarrow{KY})$,

donc, $s_{xy} = s_x\ s_y\ \cos(\overrightarrow{HX}\ ;\ \overrightarrow{KY})$

donc, $\cos(\overrightarrow{HX}\ ;\ \overrightarrow{KY}) = r$ avec $r = \dfrac{s_{xy}}{s_x s_y}$ coefficient de corrélation

($ceci\ prouve\ -1 \le r \le 1$).



Or, selon que les vecteurs colinéaires $\overrightarrow{HX}$ et $\overrightarrow{KY'}$ sont de même sens ou de sens contraire, le nombre $r = \cos(\overrightarrow{HX}\ ;\ \overrightarrow{KY})$ est égal à $\cos a$ ou $-\cos a$, a désignant une mesure de l'angle géométrique $\widehat{K}$ du triangle YKY'.

D'autre part, le minimum YY'^2 de la somme **S** sera d'autant plus faible que a sera proche de 0, c'est-à-dire $\cos a$ voisin de 1.

Donc , l'ajustement affine par la méthode des moindres carrés sera d'autant plus pertinent que le coefficient de corrélation r sera voisin de 1 ou -1.