

Annexe

Régression linéaire

Une série d'observations de n points (x_i, y_i) peut être approximée par une droite au sens des moindres carrés.

Soit $y = ax + b$ l'équation d'une droite. A chaque x_i , on peut calculer une valeur de y qui présente par rapport à la valeur observée y_i , un excès : $(y - y_i)^2$ au sens des écarts quadratiques.

L'excès total sur tous les points est

$$E = \sum (y_i - y)^2 = \sum (y_i - (ax_i + b))^2$$

L'ajustement consistera à trouver la droite de coefficient a et b qui minimise cet excès. Les variations de l'excès par rapport aux coefficients a et b , sont données par les dérivées partielles de E par rapport à a et b

$$\frac{\partial E}{\partial a} \quad \text{et} \quad \frac{\partial E}{\partial b}$$

L'excès E sera minimal lorsque les dérivées partielles s'annuleront.

$$\frac{\partial E}{\partial a} = 0 = \sum [-2 x_i (y_i - (ax_i + b))]$$

$$\frac{\partial E}{\partial b} = 0 = \sum [-2 (y_i - (ax_i + b))]$$

Il reste à résoudre un système à deux inconnues et deux équations :

$$\sum [x_i \cdot y_i] - a \sum [x_i^2] - b \sum [x_i] = 0 \quad \sum [y_i] - a \sum [x_i] - n b = 0$$

En procédant par élimination, on obtient les coefficients a et b

$$a = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad b = \frac{\sum y_i - a \sum x_i}{n}$$

On peut calculer le coefficient de corrélation linéaire

$$R = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{\sqrt{(n \sum x_i^2 - \sum x_i \sum y_i) (n \sum y_i^2 - \sum x_i \sum y_i)}}$$

toujours positif, qui vaut 1 si la droite passe par tous les points, et moins que 1 autrement.

Pour obtenir les sigmas sur les coefficients a et b , on calcule la valeur intermédiaire de la variance

$$var = \frac{\sum y^2 + n b^2 + a^2 \sum x_i^2 - 2(a \sum x_i y_i + b \sum y_i - a b \sum x_i)}{(n - 2)}$$

$$\sigma_a = \sqrt{\frac{n \cdot var}{n \sum x_i^2 - \sum x_i^2}} \quad \sigma_b = \sqrt{\frac{\sum x_i^2 \cdot var}{n \sum x_i^2 - \sum x_i^2}}$$

Bevington P. R. - Data Reduction and Error analysis for the Physical Sciences - McGraw-Hill Book Company – 1969