4.6 Bases orthogonales et bases orthonormales de $\mathbb{R}^n$

Rappelons la définition suivante introduite dans le chapitre 0.

Définition 4.6.1 On dit que deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$ sont orthogonaux si leur produit scalaire est nul.

Exemple 4.6.1

a) $(1,-1),(1,1)$ sont orthogonaux.

b) $(-1,0,1),(0,1,0),(1,0,1)$ sont mutuellement orthogonaux.

Proposition 4.6.1 *Un ensemble de vecteurs non nuls et mutuellement orthogonaux est toujours linéairement indépendant.*

DÉMONSTRATION: Soit $S=\{v_1,\ldots,v_k\}$ un tel ensemble. Considérons une combinaison quelconque de ces vecteurs qui donne le vecteur $\vec{0}$.

$$\alpha_1\vec{v}_1+\alpha_2\vec{v}_2+\ldots+\alpha_n\vec{v}_n=\vec{0}.$$

Si nous multiplions les deux membres de l'égalité par le vecteur $\vec{v}_j$ où j est arbitraire, nous obtenons

$$\alpha_1\vec{v}_1\cdot\vec{v}_j+\alpha_2\vec{v}_2\cdot\vec{v}_j+\ldots+\alpha_n\vec{v}_n\cdot\vec{v}_j=\vec{0}.$$

Or, sauf pour l'indice $i=j$, tous les produits scalaires $\vec{v}_i\cdot\vec{v}_j$ sont nuls. Il en découle que

$$\alpha_j\vec{v}_j\cdot\vec{v}_j=0\Rightarrow\alpha_j\|\vec{v}_j\|^2=0.$$

Puisque $\vec{v}_j\neq 0$, il vient $\alpha_j=0$. Puisque ceci est vrai quelque soit j, l'ensemble est linéairement indépendant. ■

Ceci nous amène à la définition suivante.

Définition 4.6.2 Un ensemble de vecteurs de $\mathbb{R}^n$ est dit orthogonal si deux vecteurs distincts quelconques de cet ensemble sont orthogonaux. Il est dit orthonormal s'il est orthogonal et si chaque vecteur de cet ensemble est unitaire c'est-à-dire de longueur 1. Une base orthogonale est une base qui est aussi un ensemble orthogonal. Une base orthonormale est une base qui est aussi un ensemble orthonormal.

Exemple 4.6.2

a) Dans $\mathbb{R}^n$, la base canonique est orthonormale.

b) L'ensemble $W=\{(1,0,-1),(1,0,1)\}$ est orthogonal mais pas orthonormal. Il ne peut pas constituer une base de $\mathbb{R}^3$ car il n'a que deux éléments.

c) L'ensemble $W = \{(1,0,0,2), (-1,0,0,\frac{1}{2}), (0,1,1,0), (0,1,-1,0)\}$ est une base orthogonale de $\mathbb{R}^4$, mais pas orthonormale puisque $\|(0,1,1,0)\| = 2$. Pour en faire une base orthonormale, il suffit de diviser chacun des vecteurs par sa longueur. Donc

$$Z = \{\frac{1}{\sqrt{5}}(1,0,0,2), \sqrt{\frac{4}{5}}(-1,0,0,\frac{1}{2}), \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,1,0), \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,-1,0)\}$$

est une base orthonormale.

4.6.1 Orthonormalisation d'une base

Les bases orthonormales jouent un rôle essentiel dans les applications géométriques de l'algèbre linéaire. Donnée une base de $\mathbb{R}^n$, il existe un procédé simple pour en déduire une base orthonormale. Essentiellement, on procède par projections successives d'un vecteur sur le sous-espace engendré par ses prédécesseurs.

Exemple 4.6.3

a) $\vec{v}_1 = (1,2), \vec{v}_2 = (1,-1)$ forment une base de $\mathbb{R}^2$, qui n'est pas orthogonale. Soit

$$\vec{u} = \text{proj}_{\vec{v}_1}(\vec{v}_2) = -\frac{1}{5}(1,2).$$

Le vecteur $\vec{w} = \vec{v}_2 - \vec{u} = (\frac{6}{5}, -\frac{3}{5})$ est orthogonal à $\vec{v}_1$ puisque

$$\vec{v}_1 \cdot \vec{w} = \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 - \vec{v}_1 \cdot (\frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_1})\vec{v}_1 = \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 - (\frac{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2}{\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_1})\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_1 = \vec{0}.$$

Donc $(1,2), (\frac{6}{5}, -\frac{3}{5})$ forment une base orthogonale de $\mathbb{R}^2$.

b) On aurait pu procéder dans l'autre sens et projeter $(1,2)$ sur $(1,-1)$. La base obtenue serait $\{(1,-1), \frac{3}{2}(1,1)\}$. Il y a donc plusieurs façons d'orthogonaliser une base et il faudra ordonner les vecteurs.

Il est facile de projeter un vecteur sur un autre. Il l'est un peu moins de le projeter sur un sous-espace. Nous avons la proposition suivante :

Proposition 4.6.2 *Soit $S = \{\vec{v}_1, \ldots, \vec{v}_k\} \subset \mathbb{R}^n$ un ensemble orthogonal de k vecteurs et $\vec{w}$ un vecteur qui n'est pas dans S. La projection de $\vec{w}$ sur S est donnée par*

$$proj_S(w) = \sum_{i=1}^{k} \frac{\vec{w} \cdot \vec{v}_i}{\|\vec{v}_i\|^2} v_i.$$

Démonstration: Géométriquement, on voit que la projection de $\vec{w}$ sur S est un vecteur $\vec{u}$ de S tel que $\vec{w}-\vec{u}$ est perpendiculaire à tous les vecteurs de S. Si $\vec{u}$ est dans S, il existe k scalaires $\alpha_i, i=1,\ldots,k$ tels que

$$\vec{u}=\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\vec{v}_i.$$

Par ailleurs $\vec{w}-\vec{u}$ sera perpendiculaire à S si et seulement si il est perpendiculaire à tous les vecteurs de la base. On doit donc avoir,

$$(\vec{w}-\sum_{i=1}^{k}\alpha_i\vec{v}_i)\cdot\vec{v}_j=0, \quad \forall j=1,\ldots k.$$

Puisque les éléments de S sont mutuellement orthogonaux, ceci se réduit à

$$\vec{w}\cdot\vec{v}_j-\alpha_j\|\vec{v}_j\|^2=0, \Rightarrow \alpha_j=\frac{\vec{w}\cdot\vec{v}_j}{\|\vec{v}_j\|^2}.$$

Le résultat est obtenu en reportant cette valeur du coefficient dans l'expression de $\vec{u}$. ∎

Nous sommes maintenant en mesure de décrire l'algorithme d'orthogonalisation de Gramm-Schmidt.

Algorithme 4.6.1

Données : un ensemble ordonné $S=\{\vec{v}_1,\ldots,\vec{v}_k\}$ de k vecteurs linéairement indépendants de $\mathbb{R}^n$

Sortie : une base orthogonale $\hat{S}$ de lin(S).

$\vec{w}_1=\vec{v}_1.$

Pour $j=1,\ldots k-1$

a) $\vec{u}=\sum_{i=1}^{j}\mathit{proj}_{\vec{w}_i}(\vec{v}_{j+1}).$

b) $\vec{w}_{j+1}=\vec{v}_{j+1}-\vec{u}.$

$\hat{S}=\{\vec{w}_1,\ldots,\vec{w}_k\}.$

Si, dans l'algorithme précédent $k=n$, S est une base ordonnée et l'ensemble $\hat{S}$ est une base orthogonale dont on peut tirer une base orthonormée en normalisant chacun des vecteurs.

Exemple 4.6.4

a) $S = \{(2,2,0), (-1,3,1), (0,1,0)\}$. On aura successivement

- $\vec{w}_1 = (2,2,0)$
- $\vec{u} = \dfrac{(-1,3,1)\cdot(2,2,0)}{8}(2,2,0) = (1,1,0)$
- $\vec{w}_2 = \vec{v}_2 - \vec{u} = (-2,2,1)$
- $\vec{u} = \dfrac{(0,1,0)\cdot(2,2,0)}{8}(2,2,0) + \dfrac{(0,1,0)\cdot(-2,2,1)}{9}(-2,2,1) = (\dfrac{1}{18}, \dfrac{17}{18}, 1)$
- $\vec{w}_3 = \vec{v}_3 - \vec{u} = (-\dfrac{1}{18}, \dfrac{1}{18}, -\dfrac{2}{9})$

b) $S = \{(-1,0,1,2), (1,2,-3,0), (0,-2,3,1), (1,1,-1,0)\}$.

```
> with(LinearAlgebra) :
> S :=[Vector(4,[-1,0,1,2]),Vector(4,[1,2,-3,0]),Vector(4,[0,-2,3,1]),Ve
ctor(4,[1,1,-1,0])] ;
```

$$S := [[-1, 0, 1, 2], [1, 2, -3, 0], [0, -2, 3, 1], [1, 1, -1, 0]]$$

```
> w :=[seq(Vector(4,[0,0,0,0]),i=1..4)] ;
```

$$w := [[0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0]]$$

```
> w[1] :=S[1] ;
```

$$w_1 := [-1, 0, 1, 2]$$

$>$ for j from 1 to 3 do
$v := S[j+1]$
$u := (DotProduct(v, w[1])/norm(w[1], 2)^2) * w[1]$:
for i from 2 to j do
$ww := w[i]$:
$u := u + (DotProduct(v, ww)/norm(ww, 2)^2) * ww$:
od;
$unassign('i')$:
$w[j+1] := v - u$:
od :

```
> print(w) ;
```

$$[[-1, 0, 1, 2], \left[\frac{1}{3}, 2, \frac{-7}{3}, \frac{4}{3}\right], \left[\frac{19}{17}, \frac{-5}{17}, \frac{3}{17}, \frac{8}{17}\right], \left[\frac{2}{27}, \frac{8}{27}, \frac{2}{9}, \frac{-2}{27}\right]]$$

4.7 Changement de système de coordonnées

Parmi les changements de systèmes de coordonnées que l'on étudie en physique et en calcul, les plus simples sont ceux qui sont linéaires. Ces changement correspondent à un changement de base dans l'espace physique et à un changement de repère dans sa version géométrique. Encore une fois, l'algèbre des matrices nous permet de simplifier leur présentation.

Commençons par rappeler la propriété suivante, maintes fois évoquée.

Alerte 4.7.1 Soit $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_k$ k vecteurs de $\mathbb{R}^n$. La relation linéaire

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i \vec{v}_i,$$

peut aussi s'écrire

$$\left(\vec{v}_1 \quad | \quad \dots \quad | \quad \vec{v}_k \right) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_k \end{pmatrix} = \vec{v}.$$

Soit $\mathcal{B} = \{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_k\}$ une base ordonnée de $V = \mathbb{R}^k$. Tout vecteur de V peut s'écrire, de façon unique, comme une combinaison linéaire des vecteurs de $\mathcal{B}$. Soit $\vec{v} \in V$ et $a_1, \dots a_n$ les coefficients (des scalaires), de la combinaison correspondante. Posons

$$[v]_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}.$$

En vertu de la remarque précédente, si B est la matrice dont les colonnes sont les éléments de $\mathcal{B}$ on a

$$[v]_{\mathcal{B}} = B^{-1}\vec{v}. \tag{4.1}$$

Le vecteur $[v]_{\mathcal{B}}$ est appelé vecteur des coordonnées de $\vec{v}$ dans la base $\mathcal{B}$ et la relation (4.1) qui permet de passer de la représentation de $\vec{v}$ dans la base canonique à sa représentation dans la base $\mathcal{B}$ est appelée formule de changement de base alors que B^{-1} est la matrice de changement de base.

Exemple 4.7.1

a) Soit $\mathcal{E}$ la base canonique de $\mathbb{R}^n$. Par définition, pour tout vecteur,

$$\vec{v} = [v]_{\mathcal{E}}.$$

b) Soit $\mathcal{B} = [\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}]$ une base ordonnée de $\mathbb{R}^2$. Cherchons les coordonnées de $\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ dans cette base, c'est-à-dire cherchons a, b pour lesquels

$$a - b = 1, \quad a + b = 0.$$

La solution est $a = \frac{1}{2}, b = -\frac{1}{2}$, donc

$$[x]_{\mathcal{B}} = (\,\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\,).$$

Par ailleurs

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow B^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

On a bien

$$[x]_{\mathcal{B}} = (\,\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\,) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ainsi, pour $\vec{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$,

$$[y]_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

c) Soit

$$\mathcal{B} = \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \right], \quad \mathcal{C} = \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right].$$

Nous cherchons une matrice qui nous permette de passer de la base $\mathcal{B}$ à la base $\mathcal{C}$. Soit $\vec{z}$ un vecteur arbitraire de $\mathbb{R}^3$. Si B et C sont les matrices dont les colonnes sont les vecteurs des deux bases, nous savons que

$$[z]_{\mathcal{C}} = C^{-1}\vec{z}.$$

Mais, $\vec{z} = B[z]_{\mathcal{B}}$. Donc

$$[z]_{\mathcal{C}} = C^{-1}B[z]_{\mathcal{B}}.$$

Or,

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow C^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Donc

$$C^{-1}B = \begin{pmatrix} 0 & -2 & -2 \\ 1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

En utilisant la définition, on peut vérifier directement que, si $\vec{z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $[z]_{\mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, alors que $[z]_{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. On a bien

$$[z]_{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -2 & -2 \\ 1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = C^{-1}B[z]_{\mathcal{B}}.$$

Le raisonnement utilisé dans le dernier exemple est général. Nous le résumons dans la proposition suivante.

Proposition 4.7.1 *Soit $\mathcal{B}$ et $\mathcal{C}$ deux bases ordonnées de $\mathbb{R}^n$, B et C les matrices associées. La matrice de passage de la base $\mathcal{B}$ à la base $\mathcal{C}$ est $C^{-1}B$, c'est-à-dire*

$$[z]_{\mathcal{C}} = C^{-1}B[z]_{\mathcal{B}}, \quad \forall \vec{z} \in \mathbb{R}^n.$$

Pour terminer cette section, considérons le cas d'une base orthonormée $\mathcal{C} \subset \mathbb{R}^n$, ayant comme matrice associée C. L'orthonormalité des colonnes de C peut s'écrire sous forme matricielle de la façon suivante,

$$CC^t = C^tC = I_n. \tag{4.2}$$

Les matrices qui possèdent la propriété (4.2) joueront un grand rôle dans la suite. Nous les appellerons matrices orthogonales.

Exemple 4.7.2

a) $C = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ est orthogonale.

b) $D = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$ est orthogonale.

4.8 La méthode des moindres carrés

Une des règles heuristiques énoncées au chapitre sur les systèmes linéaires, stipule qu'un système surdéterminé a rarement une solution. Pourtant ces systèmes sont nombreux et nous devons chercher à en tirer de l'information. Pour comprendre la problématique, examinons un premier exemple.

Exemple 4.8.1 Supposons que trois étudiants de physique vont au laboratoire de mécanique pour étudier les mouvements harmoniques simples à l'aide d'un système ressort-masse. Pour comparer les résultats expérimentaux et théoriques, ils doivent d'abord calculer la constante de rappel du ressort, donnée par la relation de Hooke

$$kx = p,$$

où p est le poids suspendu au ressort, x l'élongation résultante et k la constante de rappel cherchée. On suppose qu'ils ont une balance pour mesurer les poids p et une règle pour mesurer l'élongation x. Le résultat de trois mesures différentes est donné par le système ci-dessous

$$\left\{\begin{array}{rcl} 4k & = & 3 \\ 7k & = & 5 \\ 11k & = & 8 \end{array}\right. \tag{4.3}$$

Ce système n'a, bien sûr, pas de solution. Pourtant le ressort a une constante de rappel. La difficulté est créée par l'imprécision des mesures qui est telle que les trois essais ne donnent pas exactement la même réponse. Il est alors raisonnable de chercher à extraire de l'information disponible *la meilleure approximation de cette constante*.

Le problème est de définir ce que nous appelons meilleure approximation. Gauss et Legendre ont proposé l'approche suivante : pour chaque équation, définissons le résidu

$$r(k) = kx - p.$$

Nous cherchons la valeur de k pour laquelle la somme des carrés des résidus

$$S(k) = (4k-3)^2 + (7k-5)^2 + (11k-8)^2, \tag{4.4}$$

est minimale.
Comme $S(k)$ est une fonction quadratique, l'abscisse k du minimum est facile à trouver par dérivation, c'est la solution de l'équation linéaire

$$S'(k) = 8(4k-3) + 14(7k-5) + 22(11k-8) = 0,$$

c'est-à-dire $k = \frac{270}{372}$.

Dans ce premier modèle, nous avons fait l'hypothèse que les étudiants peuvent mesurer l'élongation du ressort. Ceci suppose qu'ils disposent d'une valeur précise de la longueur

Etirement x	6.9	7.6	8.7	10.4	11.6
Poid p	1.0	2.0	4.0	6.0	8.0

TAB. 4.1 – Etirement en fonction du poids

initiale ℓ du ressort et qu'ils mesurent l'élongation en faisant la différence entre la longueur du ressort étiré et ℓ. S'ils ne possédent pas une telle valeur, le modèle s'écrit plutôt

$$k(x - \ell) = p$$

où, cette fois, x mesure la longueur totale du ressort et pas seulement son élongation. Il faut maintenant tirer des données, une approximation de k et ℓ. Posons $b = -k\ell$, toute approximation de b et k permet d'obtenir une approximation de ℓ. Nos étudiants sont retournés à leur site expérimental et ont obtenu les données du tableau 4.1.

Encore une fois, nous cherchons la meilleure approximation du vecteur d'inconnues (b, k) défini par le système **surdéterminé**

$$b + kx_i = p_i, i = 1, \ldots, 5.$$

Si

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \\ 1 & x_5 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_5 \end{pmatrix}, \quad K = (b, k), \tag{4.5}$$

ce système 5×2 s'écrit $AK = P$, le résidu (un vecteur) devient $R(K) = AK - P$ et la fonction a minimiser est

$$S(K) = \sum_{i=1}^{5} (b + x_i k - p_i)^2 = \|AK - P\|^2.$$

Remarquons que tous les vecteurs de la forme AK sont des combinaisons linéaires des colonnes de A et que $S(K)$ n'est rien d'autre que la carré de la distance de P à une telle combinaison. Puisque A a deux colonnes, l'ensemble de ces combinaisons forme un plan dans l'espace à 5 dimensions. Ce qu'on veut, c'est trouver le point de ce plan qui est le plus près de P.

A ce point, est associé le vecteur $A\hat{K}$, projection de P sur le plan, c'est-à-dire celui pour lequel le résidu $R(\hat{K}) = A\hat{K} - P$ est perpendiculaire au plan. Ceci sera vrai si et seulement si, pour tout autre vecteur K

$$R(\hat{K}) \cdot AK = 0, \quad \text{i.e. } 0 = A^t R(\hat{K}).K, \ \forall K \in \mathbb{R}^2. \tag{4.6}$$

Mais $A^t R(\hat{K})$ est un vecteur de $\mathbb{R}^2$ qui doit être perpendiculaire à tous les autres. Il doit donc être nul. Ainsi, on aura un minimum de $S(K)$ pour le vecteur $\hat{K}$ solution du système lináire

$$0 = A^t R(\hat{K}) = A^t(A\hat{K} - P) \Rightarrow A^t A\hat{K} = A^t P. \tag{4.7}$$

Le système $n \times n$ (où n est le nombre de colonne de A) $A^t A\hat{K} = A^t P$ est appelé **système des équations normales**. Une solution de ce système, qui doit exister puisque la projection de P sur l'espace colonne existe, est un vecteur pour lequel le carré de la norme du résidu est minimale.

Dans le cas présent, le système s'écrit

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 6.9 & 7.6 & 8.7 & 10.4 & 11.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 6.9 \\ 1 & 7.6 \\ 1 & 8.7 \\ 1 & 10.4 \\ 1 & 11.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 6.9 & 7.6 & 8.7 & 10.4 & 11.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.0 \\ 2.0 \\ 4.0 \\ 6.0 \\ 8.0 \end{pmatrix},$$

c'est-à-dire

$$\begin{pmatrix} 5 & 45.2 \\ 45.2 & 432.78 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21.0 \\ 212.1 \end{pmatrix}.$$

La solution est

$$b = -9.063274471, k = 1.467176380]) \Rightarrow \ell = -\frac{b}{k} = 6.177358493.$$

La paire (b, k) n'est pas solution du système de départ, c'est cependant la paire pour laquelle l'écart quadratique $\|A(b, k) - P\|^2$ est minimal. Cette méthodologie est générale, nous allons maintenant l'examiner de plus près.

4.9 La méthode des moindres carrés : étude théorique.

Dans cette section, nous supposons que $A \in M_{m,n}$ où $m \geq n$ et $P \in \mathbb{R}^m$ sont donnés. On dira que $\hat{X} \in \mathbb{R}^n$ est **une** solution aux moindres carrés du système surdéterminé

$$AX = P \tag{4.8}$$

si $\hat{X}$ est un point de minimum de $S(X) = \|R(X)\|^2 = \|AX - P\|^2$. Nous avons montré que $\hat{X}$ est un point de minimum, si et seulement si, $\hat{X}$ est une solution des equations normales

$$A^t AX = A^t P. \tag{4.9}$$

Géométriquement, il est clair que ces équations doivent toujours avoir une solution (on peut toujours (!) projeter un point sur un sous-espace) mais est-on assuré qu'une telle solution est unique ? Nous allons d'abord étudier cette question sur le système suivant

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -3 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & -2 \\ 1 & 0 & 1 & -2 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & -3 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}. \tag{4.10}$$

Une forme échelon de A est donnée par

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -3 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & -4 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

et nous voyons que la matrice est de rang 2. En particulier, le système homogène de matrice A possède une infinité de solutions. Si $\vec{x}$ est une telle solution, puisque $A\vec{x} = \vec{0}$, pour toute solution $\vec{y}$ des équations normales, on aura $A^t(A(\vec{x} + \vec{y}) = A^tA\vec{y} = \vec{b}$, et le système des équations normales n'aura pas une solution unique. Qu'en est-il de la situation inverse ? Supposons cette fois que la matrice du système est plutôt

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -3 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & -2 \\ 1 & 0 & 1 & -2 & -1 \\ 1 & -1 & -7 & 0 & -3 \\ 1 & -1 & 0 & 12 & 33 \end{pmatrix},$$

cette fois la forme échelon est

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & -3 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & -4 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 36 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Cette fois, le système homogène ne possède que la solution nulle et la situation précédente ne peut pas se produire. On pourrait aller plus loin et démontrer la proposition suivante

Proposition 4.9.1 *Soit $A \in M_{m,n}, m > n$, si rang$(A) = n$ pour tout vecteur $\vec{b}$ les équations normales (4.9) possède une solution unique.*

Nous pouvons maintenant résumer ce qui précède. Pour trouver une solution aux moindres carrés de (4.8) :

(a) former les équations normales (4.9) ;

(b) résoudre les équations normales ;

(c) si rang $(A) = n$, la solution obtenue est unique ;

(d) si rang $(A) < n$, il y a une infinité de solution ;

Finissons par un exemple.

Exemple 4.9.1 Un problème de contrôle de la qualité.

On suppose qu'un sous-traitant d'une grande compagnie automobile produit des pistons. La qualité de ces derniers dépend de plusieurs facteurs, mais l'un des plus important est "l'ovalité". Un piston doit être aussi parfaitement cylindrique que possible, sinon l'adhérence des segments sur la paroi du cylindre est mauvaise, ce qui peut causer une perte de pression par la base, souvent remarquée lors d'un examen du filtre à air d'un vieux véhicule.

Pour mesurer cette qualité, l'industriel utilisera des instruments optiques qui détermineront les coordonnées de certains points du pourtour du piston. Ces points étant obtenus, il faudra décider s'il est raisonnable de croire que ces points sont bien sur un cercle.

Supposons donnés n points $(x_i, y_i), i = 1, \ldots, n$, on veut donc trouver trois constantes (x_0, y_0) et r, les coordonnées du centre du cercle et son rayon pour, lesquels le système

$$(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2 = r^2, i = 1, \ldots, n, \tag{4.11}$$

est satisfait au sens de moindres carrés. Le système (4.11) n'est pas linéaire en x_0, y_0, r mais il est facile de remédier à cela. En effet, si on développe les carrés et que l'on pose $a = 2x_0$, $b = 2y_0$ et $c = r^2 - (x_0^2 + y_0^2)$, le système devient

$$ax_i + by_i + c = x_i^2 + y_i^2, i = 1, \ldots, n. \tag{4.12}$$

Posons

$$A = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n & y_n & 1 \end{pmatrix}, \quad K = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} x_1^2 + y_1^2 \\ x_2^2 + y_2^2 \\ \vdots \\ x_n^2 + y_n^2 \end{pmatrix}, \tag{4.13}$$

le système (4.12) se récrit donc sous la forme du système surdéterminé

$$AK = P, \tag{4.14}$$

Soit $B = A^t A$ est la matrice du système des équations normales, elle peut toujours s'écrire

$$B = \begin{pmatrix} \|X\|^2 & X \cdot Y & n\bar{X} \\ X \cdot Y & \|Y\|^2 & n\bar{Y} \\ n\bar{X} & n\bar{Y} & n \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

x	-1	-2	1.1	2.4
y	-2	2.4	-4	-1.6

TAB. 4.2 – Le repérage du tour du piston

où $X = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^t$, $Y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)^t$ alors que $\bar{X}$ et $\bar{Y}$ sont les moyennes des entrées de X et Y respectivement.
Supposons maintenant que nous ayons l'ensemble de données du tableau 4.2.

Nous utilisons Maple pour faire les calculs.

```
> x :=Vector(4,[-1,-2,1.1,2.4]);
```

$$x := [-1, -2, 1.1, 2.4]$$

```
> y :=Vector(4,[-2,2.4,-4,-1.6]);
```

$$y := [-2, 2.4, -4, -1.6]$$

```
> un :=Vector(4,1);
```

$$un := [1, 1, 1, 1]$$

```
> A :=<x|y|un>;
```

$$A := \begin{bmatrix} -1 & -2 & 1 \\ -2 & 2.4 & 1 \\ 1.1 & -4 & 1 \\ 2.4 & -1.6 & 1 \end{bmatrix}$$

```
> AtA :=Transpose(A).A;
```

$$AtA := \begin{bmatrix} 11.97 & -11.04 & 0.5 \\ -11.04 & 28.32 & -5.2 \\ 0.5 & -5.2 & 4 \end{bmatrix}$$

```
> norm(x,2)^2;
```

$$11.97000000$$

```
> norm(y,2)^2;
```

$$28.32000000$$

```
> DotProduct(x,y);
```

$$-11.04$$

```
> sum(x[i],i=1..4);
```

$$0.5$$

```
> sum(y[i],i=1..4);
```

$$-5.2$$

```
> P :=Vector(4,[seq(x[i]^2+y[i]^2,i=1..4)]);
```

$$P := [5, 9.76, 17.21, 8.32]$$

```
> AtP :=Transpose(A)*P;
```

$$AtP := [14.379, -68.728, 40.29]$$

```
> sol :=LinearSolve(AtA,AtP);
```

$$sol := [0.212018800, -0.656220995, 9.192910356]$$

```
> x0 :=0.5*sol[1];
```

$$x0 := 0.1060094000$$

```
> y0 :=0.5*sol[2];
```

$$y0 := -0.3281104975$$

```
> rcarre :=sol[3]-x0^2-y0^2;
```

$$rcarre := 9.074015864$$

```
> points :=[seq([x[i],y[i]],i=1..4)];
```

$$points := [[-1, -2], [-2, 2.4], [1.1, -4], [2.4, -1.6]]$$

```
> desspoints :=pointplot(points,symbol=diamond,color=blue) :
> desscercle :=implicitplot((x-x0)^2+(y-y0)^2-rcarre=0,x=-5..5,y=-5..5) :
> display(desspoints,desscercle,axes=framed,scaling=constrained);
```