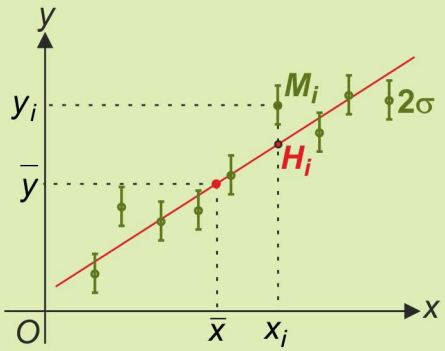
Capacité numérique : simuler, à l'aide d'un langage de programmation ou d'un tableur, un processus aléatoire de variation des valeurs expérimentales de l'une des grandeurs – simulation Monte-Carlo – pour évaluer l'incertitude sur les paramètres du modèle.

Régression linéaire (ajustement affine)

On peut vérifier expérimentalement que deux grandeurs physiques X et Y sont compatibles avec un modèle $Y = f(X)$. Plaçons-nous dans le cas où on modélise la relation entre deux grandeurs physiques X et Y par $Y = aX + b$.

On réalise une série de N mesures indépendantes de ces grandeurs, notées (X_i, Y_i), $i \in [\![1, N]\!]$. On obtient (x_i, y_i), $i \in [\![1, N]\!]$, avec des écarts-types $(u(X_i), u(Y_i))$, $i \in [\![1, N]\!]$. On se pose la question suivante : La relation $Y = aX + b$ est-elle bien vérifiée ? Quelles sont alors les valeurs expérimentales de a et b et les incertitudes sur ces coefficients ?

Même si le modèle affine est valide, les points de coordonnées (x_i, y_i) $i \in [\![1, N]\!]$ ne sont pas parfaitement alignés du fait des incertitudes de mesure.



Nous nous placerons par défaut dans le cas suivant (régression linéaire ordinaire) :

— L'incertitude-type sur X est négligeable, soit $|a| \cdot u(X_i) << u(Y_i)$ $\forall i \in [\![1, N]\!]$.

— Les incertitudes-type $u(Y_1) = u(Y_2) = ... = u(Y_N) = \sigma$ sont toutes identiques.

Ce dernier critère n'est pas souvent vérifié, ne serait-ce que parce que l'on ne se ramène souvent à une relation affine qu'après un changement de variable $Y = g(\Gamma)$, où Γ est la grandeur dont le mesurage fournit des valeurs γ_i, $i \in [\![1, N]\!]$. Même si $u(\Gamma_i) = \sigma$ $\forall i \in [\![1, N]\!]$, les incertitudes-type sur $Y_i = g(\Gamma_i)$ ne sont pas toutes les mêmes.

On montre que la droite recherchée est telle que la grandeur $\chi^2 = \dfrac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i - f(x_i)\right]^2 = \dfrac{S}{\sigma^2}$ est minimale.

Graphiquement, S représente la somme des carrés des distances H_iM_i, où M_i est le point de coordonnées (x_i, y_i) et H_i le projeté de M_i sur la droite d'équation $Y = aX + b = f(X)$ selon la direction Oy. Cette méthode porte en conséquence le nom de **méthode des moindres carrés**.

La fonction $(a,b) \mapsto S = \sum_{i=1}^{N}\left[y_i - ax_i - b\right]^2$ passe par un minimum si $\dfrac{\partial S}{\partial a} = 0$ et $\dfrac{\partial S}{\partial b} = 0$, soit :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{N}\left[a{x_i}^2 - x_i y_i + bx_i\right] = 0 \\ \sum_{i=1}^{N}\left[b - y_i + ax_i\right] = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a\sum_{i=1}^{N} {x_i}^2 + b\sum_{i=1}^{N} x_i = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \\ a\sum_{i=1}^{N} x_i + Nb = \sum_{i=1}^{N} y_i \end{cases}.$$

En divisant ces deux dernières relations par N, on obtient $\begin{cases} a\overline{x^2} + b\overline{x} = \overline{xy} \\ a\overline{x} + b = \overline{y} \end{cases}$, en notant avec une barre les grandeurs moyennes *expérimentales*. Les meilleurs estimateurs de la pente et de l'ordonnée à l'origine de la droite de régression cherchée (droite de régression de y en x) sont donc $a = \frac{\overline{xy} - \overline{x}\,\overline{y}}{\overline{x^2} - \overline{x}^2}$ et $b = \overline{y} - a\overline{x}$. L'équation de la droite recherchée est $y - \overline{y} = a(x - \overline{x})$. Elle passe par le point moyen $(\overline{x}, \overline{y})$ du nuage de points.

Déterminer l'incertitude-type sur *a* et *b* par la méthode de Monte-Carlo

La fonction python **`polyfit`** du module `numpy` permet de réaliser un ajustement d'une série de valeurs avec un polynôme, ici de degré 1. Elle renvoie sous forme de tableau les valeurs de la pente a et de l'ordonnée à l'origine b.
Utilisons une simulation de Monte-Carlo pour obtenir $u(a)$ et $u(b)$ à partir d'une série de mesures (x_i, y_i). On se place dans le cas où la distribution des Y_i est quelconque, avec des incertitudes-types σ *identiques*.

— (i) On simule N_MC jeux de mesures $(x_i^j = x_i, y_i^j = y_i + \varepsilon_i^j)$ où ε_i suit la distribution choisie (ici uniforme), centrée sur 0 et d'incertitude-type σ.
— (ii) On effectue un ajustement affine grâce à `polyfit` sur chaque jeu de mesures et on obtient N_MC valeurs des coefficients de la droite d'ajustement (a_j, b_j), $j \in [1, \text{N_MC}]$.

— (iii) On en déduit les valeurs moyennes a^* et b^* et les écarts-types $u(a)$ et $u(b)$.

Le code python suivant met en œuvre cette démarche et permet de tracer le nuage des points expérimentaux $M_i(x_i, y_i)$ avec les barres d'incertitude de taille 4σ, ainsi que les histogrammes des valeurs simulées de a et b. Les résidus normalisés $Z_i = \left[y_i - (a^* xi + b^*) \right] / \sigma$ sont étudiés en traçant les points de coordonnées (x_i, Z_i).

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
import numpy.random as rd

def AjustAff_MC(Lx,Ly,sigma,fig = True):
    # partie à connaître
    Lx,Ly = np.asarray(Lx),np.asarray(Ly) # tableaux numpy
    N_MC = 100000 # nombre d'expériences simulées
    a_MC, b_MC = np.zeros(N_MC),np.zeros(N_MC) # initialisation des
listes contenant pentes et ordonnées à l'origine simulées
    for j in range(N_MC): # pour chaque expérience simulée
    # on simule la mesure de Y pour toutes les valeurs de X
        Ly_MC = Ly + rd.uniform(-sigma*3**0.5,sigma*3**0.5, size =
len(Lx))
        # on effectue l'ajustement affine pour cette expérience simulée
        p = np.polyfit(Lx, Ly_MC, 1)
        # on stocke les valeurs des paramètres d'ajustement dans les
listes a_MC et b_MC
        a_MC[j] = p[0]
        b_MC[j] = p[1]
```

```
    a_moy = np.mean(a_MC)
    u_a = np.std(a_MC, ddof = 1)
    b_moy = np.mean(b_MC)
    u_b = np.std(b_MC, ddof = 1)
    print('pente a = ',a_moy)
    print('incertitude-type : u(a) = ',u_a)
    print('ordonnée à l\'origine b = ',b_moy)
    print('incertitude-type : u(b) = ', u_b)

# partie graphique ; il n'est pas nécessaire de la mémoriser
    if fig == True:
        X = np.array([np.min(Lx),np.max(Ly)])
        Y = a_moy*X +b_moy
        plt.figure('points et ajustement affine')
        plt.errorbar(Lx,   Ly,   yerr   =   2*sigma,fmt='or',ecolor   =
'black',elinewidth = 3,label = 'points expérimentaux')
        plt.xlabel('$X$')
        plt.ylabel('$Y$')
        plt.plot(X,Y, label = 'ajustement affine',color = 'blue',)
        plt.legend(fontsize = 15)
        plt.show()
        Z = (Ly-(a_moy*Lx+b_moy))/(sigma)
        plt.figure('résidus normalisés ajustement affine Monte Carlo')
        plt.plot(Lx, Z,'o',color = 'red')
        marge = abs(np.max(Lx)-np.min(Lx))/100
        plt.fill_between([np.min(Lx),np.max(Lx)], y1 = -2, y2 = 2, color
= 'olive',alpha = 0.4)
        plt.xlim(np.min(Lx)-marge,np.max(Lx)+marge)
        plt.ylim(-3,3)
        plt.xlabel('$X$')
        plt.ylabel('résidus normalisés de $Y$')
        plt.grid()
        plt.show()
    return (a_MC,b_MC) # la fonction renvoie l'ensemble des valeurs
simulées pour une utilisation ultérieure
```

On prend l'exemple d'un réseau optique en incidence normale. La formule utilisée est $\sin i' = n\lambda$ où $i' = \alpha - \alpha_0$ est l'angle entre la direction α_0 de la raie d'ordre 0 et la direction α de la raie d'ordre 1 correspondant à la longueur d'onde λ. n est le nombre de traits par mètre que comprend le réseau. On réalise pour chaque raie de longueur d'onde connue les mesures de i'.

λ(nm)	i'(°)	$n = \frac{\sin i'}{\lambda}$ (traits/mm)	$u(n)$
404,7	13,35	570,5	
407,8	13,45	570,4	
435,8	14,37	569,5	
491,6	16,27	569,9	
546,1	18,17	571,0	
577,0	19,23	570,8	
579,1	19,27	569,9	
623,4	20,8	569,6	

On cherche à valider (ou non) la loi affine théorique $Y = \sin i' = n\lambda = aX + b$, avec $X = \lambda$, et, si le modèle est validé, à donner une valeur de n avec son incertitude-type.

Q.1) Les angles i' sont obtenus par *différence* entre deux angles mesurés grâce au goniomètre avec une tolérance de 1', ce qui signifie par exemple que lorsqu'on mesure $i' = 13°21'$, on considère que la valeur réelle se trouve dans l'intervalle $[13°20', 13°22']$. En déduire l'incertitude-type sur i' en radian.

Q.2) Relier par la méthode analytique l'incertitude-type $u(n)$ à n, i', et $u(i')$. Remplir la colonne du tableau donnant $u(n)$. Pourquoi faut-il nécessairement que $u(i')$ soit exprimé en radian pour les applications numériques ?
$u(n)$ est-il constant ? Quelles sont les longueurs d'onde permettant d'obtenir une incertitude-type sur n la plus faible ?

Par la suite, on considérera, conformément au programme, que $u(n)$ est constant, égal à la plus grande des valeurs du tableau.

Q.3) Déterminer, grâce à la méthode de Monte-Carlo, la valeur n^* du nombre de traits par mm du réseau que l'on peut proposer, ainsi que l'incertitude-type $u(n)$.
Comparer $u(n)$ aux incertitudes-type du tableau. Commenter.
Tracer le nuage de points expérimentaux avec les barres d'incertitude et la droite d'ajustement affine, les histogrammes des valeurs simulées de a et b, ainsi que les résidus normalisés en fonction de $X = \lambda$.
Le modèle affine est-il compatible avec les mesures effectuées ?

Ajustement linéaire

Dans le modèle affine utilisé, le coefficient b n'est pas fixé, alors que la loi physique est une loi linéaire, et pas affine : $Y = \sin i' = n\lambda = aX$.
C'est ce mauvais choix de modèle qui est responsable d'une surestimation de $u(n)$, comme nous allons le voir.

Si le modèle physique choisi est linéaire : $Y = aX = f(X)$, on obtient, en reprenant la méthode des moindres carrés : $\boldsymbol{a = \dfrac{\overline{xy}}{\overline{x^2}}}$.

Q.4) Comme `polyfit` ne permet pas d'effectuer des ajustements linéaires, coder sous Python une fonction **`linfit(Lx, Ly)`** qui renvoie le coefficient a à partir des listes `Lx` et `Ly` contenant respectivement les valeurs x_i et y_i, avec $i \in [\![1, N]\!]$.

Adapter la fonction `AjustAff_MC` en `AjustLin_MC` afin d'obtenir a^* et son incertitude-type par la méthode de Monte-Carlo. Cette fonction doit également permettre de tracer le nuage de points expérimentaux avec les barres d'incertitudes et la droite d'ajustement linéaire, les histogrammes des valeurs simulées de a, ainsi que les résidus normalisés.

Q.5) Déterminer, grâce à la méthode de Monte-Carlo, la valeur n^* du nombre de traits par mm du réseau que l'on peut proposer, ainsi que l'incertitude-type $u(n)$. Le modèle linéaire est-il compatible avec les mesures effectuées ?
Comparer l'ajustement linéaire à l'ajustement affine.

En conclusion, notamment pour les TIPE :
Il ne faut pas prendre plus de paramètres dans le modèle utilisé que ceux présents dans la théorie.
Si aucune théorie n'est disponible, des modèles différents peuvent être adaptés aux valeurs expérimentales. On en choisit un et on obtient alors une loi *empirique*.

Comme le programme impose d'utiliser `polyfit`, on utilisera l'ajustement affine $Y = aX + b$ bien que la loi théorique soit linéaire, mais il est bienvenu de critiquer cette démarche.

On reprend donc par la suite l'ajustement affine dans le cas du réseau.

Q.6) Tracer le nuage des points de coordonnées (a_j, b_j), $j \in [\![0, \text{N_MC} - 1]\!]$ et commenter.

Q.7) On cherche maintenant à mesurer une abscisse inconnue, ainsi que son incertitude-type, à partir de la valeur expérimentale d'une ordonnée. Dans le cas du réseau optique en incidence normale, on cherche à déterminer la longueur d'onde correspondant à la raie trouvée dans la direction $i' = i'_0 = 17{,}21°$.

Justifier qu'on utilise pour cela *l'ensemble* des valeurs simulées de *a* et de *b*.
Écrire sous python une fonction `Mesure_x_inconnu(y0,sigma,a_MC, b_MC)` qui renvoie l'abscisse inconnue et son incertitude-type à partir des deux tableaux `a_MC` et `b_MC` ainsi que de l'incertitude-type sur l'ordonnée mesurée.
Appliquer cette fonction au cas du réseau. On rappelle que l'incertitude-type est prise constante, soit ici la plus grande des valeurs obtenues pour $u(Y)$, avec $Y = \sin i'$.