

Analyse de données, méthodes numériques et sciences physiques*

par J.C. TRIGEASSOU - L.A.I.I., E.S.I.P., Université, 86000Poitiers
et D. BEAUFILS - I.N.R.P., DEP4, 92120 Montrouge

Depuis une cinquantaine d'années, la réalisation de calculateurs numériques de plus en plus puissants a stimulé la recherche en traitement de données, estimation paramétrique, identification et analyse numérique. L'ensemble de ces méthodes constitue à présent l'outil fondamental de n'importe quel laboratoire, tant dans le domaine de la recherche théorique que dans celui des applications en sciences de l'ingénieur.

L'enseignement n'est pas resté à l'écart de cette évolution. Nombreux sont ceux qui ont pressenti dès les années 70 l'intérêt pédagogique de l'analyse numérique. Les premiers essais, effectués grâce aux calculatrices programmables, ont concerné les techniques de base telles que la dérivation numérique ou l'intégration d'équations différentielles (charge de condensateur, mouvement de pendule). Puis les micro-ordinateurs ont accru à la fois potentiel et vitesse de calcul, mais aussi la commodité des représentations graphiques. Leur interfaçage s'est également très rapidement généralisé et a permis une banalisation de l'expérimentation assistée par ordinateur. L'enseignant a pu alors prendre en compte un plus grand nombre de données expérimentales en associant représentations graphiques, traitements de données (moyennes, filtrage...), modélisation expérimentale et estimation paramétrique (régression linéaire en général). Il est rapidement apparu qu'il était nécessaire de mettre en place de nouvelles pratiques pédagogiques prenant en compte l'outil informatique associé à des méthodes numériques adaptées aux objectifs de l'enseignement des sciences physiques dans les lycées.

Dans la présentation ci-dessous on a volontairement privilégié la modélisation et l'analyse des données par rapport aux méthodes

* Ce texte reprend l'essentiel des éléments présentés lors du cours correspondant, fait lors des 4èmes Journées Informatique et Pédagogie des Sciences Physiques [1, 2]

numériques traditionnelles. Cette présentation non conventionnelle a été retenue pour valoriser la modélisation expérimentale qui comporte certainement plus d'éléments pédagogiques novateurs propres à notre discipline. Rappelons qu'un des objectifs des sciences physiques est de décrire sous forme de lois mathématiques ou modèles les phénomènes fondamentaux. L'outil informatique permet un retour aux principes de base de la modélisation par minimisation d'un critère quadratique ainsi qu'une approche plus concrète de la notion d'incertitude. La distinction entre modélisation expérimentale et méthodes numériques est artificielle car de nombreuses techniques d'identification sont du domaine de l'analyse numérique.

1. MODÉLISATION EXPÉRIMENTALE ASSISTÉE PAR ORDINATEUR

1.1. Le critère quadratique et sa minimisation

Pour introduire la notion de base qu'est le critère quadratique, nous considérons un exemple classique pour lequel on connaît un modèle mathématique explicite simple : le mouvement d'une masse soumise à une force constante. Dans ce cas la relation entre temps et vitesse s'écrit (moyennant un choix convenable de la date initiale) :

$$v = a \cdot t$$

Supposons que l'on dispose d'une série de résultats expérimentaux du type ci-dessous (figure 1). Comment on peut alors estimer au mieux l'accélération.

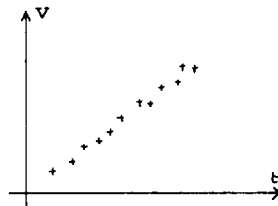


Figure 1

1.1.1. Définition du critère quadratique

Il s'agit donc d'abord de se donner les moyens d'une comparaison objective mesures/modèle. Pour cela on définit un écart $\epsilon(t)$. Si \hat{a} désigne une estimation du paramètre, l'écart est défini par :

$$\epsilon(t) = V_{\text{mes}}(t) - V_{\text{mod}}(t) = V_{\text{mes}}(t) - \hat{a} \cdot t$$

Le critère de comparaison mesures/modèle le plus couramment utilisé est le critère dit quadratique défini par :

$$J = \sum \varepsilon^2(t)$$

On peut le concrétiser (facilement grâce à l'ordinateur) en traçant la courbe représentant $J = f(\hat{a})$ pour un domaine de valeurs possibles du paramètre (figures 2 et 3). Ces courbes sont rarement tracées mais ont pourtant un intérêt pédagogique car elles permettent de visualiser des notions plus abstraites (non linéarité, précision. etc...).

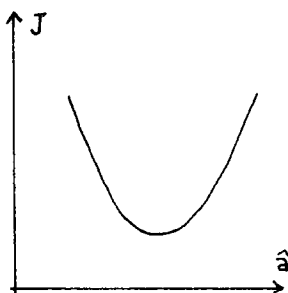


Figure 2 : parabole

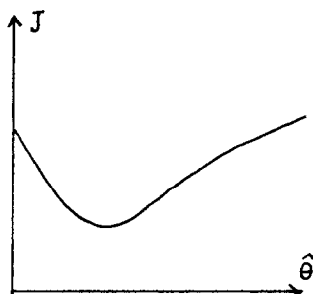


Figure 3 : courbe quelconque avec minimum :
décharge d'un condensateur

1.1.2. Minimisation du critère quadratique : introduction

La seconde étape est celle de la détermination optimale de \hat{a} , c'est-à-dire la valeur a_{opt} qui rend le critère quadratique minimal.

On peut noter d'abord que le tracé de $J = f(\hat{a})$ permet une première estimation (visuelle) de a_{opt} , que l'on peut d'ailleurs affiner en agissant sur le domaine d'exploration. Mais il est possible d'utiliser des techniques permettant d'automatiser cette recherche de l'optimum. Deux méthodes sont présentées ci-dessous.

Méthode itérative (à pas constant)

Soit a_{init} l'estimation initiale et un pas de recherche δa , et soit $a_1 = a_{init} + \text{signe} \times \delta a$, la première valeur de l'exploration.

Si l'on débute la recherche en choisissant le signe positif, alors :

- si $J(a_1) < J_{init}$, on continue
- si $J(a_1) > J_{init}$, on prend $\text{signe} = -1$ et on réitère.

A l'itération n : $a_n = a_{n-1} + \text{signe} \times \delta a$

On continue tant que $J(a_n) < J(a_{n-1})$. Lorsque $J(a_n) > J(a_{n-1})$ on arrête les itérations ou on diminue δa pour affiner la recherche (en prenant par exemple $\delta a' = \delta a/10$).

Cette méthode itérative ne permet donc pas d'obtenir la valeur exacte de a_{opt} mais de l'encadrer avec un intervalle δa que l'on peut rendre aussi faible qu'on le désire (avec toutefois la limitation liée à la précision de la machine).

Méthode analytique (des moindres carrés)

La technique précédente présente l'intérêt pédagogique de ne pas nécessiter une formulation théorique du processus de minimisation. Elle peut toutefois être avantageusement remplacée en pratique par une solution analytique, possible dans le cas présent où le modèle est linéaire par rapport au paramètre.

On peut écrire en effet :

$$\begin{aligned} J &= \sum \varepsilon_k^2 = \sum (v_k - \hat{a} \cdot t_k)^2 \\ &= \sum v_k^2 - 2\hat{a} \sum v_k \cdot t_k + \hat{a}^2 \sum t_k^2 \\ &= \alpha \hat{a}^2 + \beta \hat{a} + \mu \end{aligned}$$

On obtient ainsi l'équation d'une parabole dont le sommet (minimum) est défini par $dJ/d\hat{a} = 0$, soit :

$$a_{opt} = -\beta/2\alpha = \sum v_k \cdot t_k / \sum t_k^2$$

1.1.3. Généralisation

Modèle linéaire par rapport aux paramètres : méthode des moindres carrés

Soit un modèle $y(x)$ linéaire par rapport à N paramètres θ_n :

$$y = f_1(x) \theta_1 + \dots + f_n(x) \theta_n + \dots + f_N(x) \theta_N$$

Le critère $J = \sum \varepsilon_k^2$ est un paraboloïde fonction des N paramètres θ_n et la méthode ci-dessus peut être facilement généralisée.

La solution optimale $\theta_{opt} \{\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots\}$ est donc obtenue directement par résolution d'un système linéaire formé des N équations $\delta J / \delta \theta_n = 0$. C'est la méthode des moindres carrés, ou méthode de Gauss [9, 11, 12].

Le cas le plus couramment rencontré dans l'enseignement secondaire est celui où il existe deux paramètres (masse soumise à une force constante, avec vitesse initiale, par exemple : $v = at + v_0$, $\theta_1 = a$, $\theta_2 = v_0$). On est dans le cas classique dit de la régression linéaire.

Modèle non linéaire par rapport aux paramètres : méthode du modèle.

Si on ne peut pas écrire le modèle sous forme linéaire par rapport à θ (cas de la décharge du condensateur où $V = E \exp(-t/\theta)$) alors le problème de minimisation du critère J est non linéaire. On ne peut obtenir une approximation de l'optimum θ_{opt} que par une technique itérative d'optimisation non linéaire [5, 6, 10, 11, 12].

Les méthodes à pas constant sont très robustes mais ne sont vraiment efficaces qu'avec un nombre très réduit de paramètres. Si l'on désire accélérer la recherche, on utilisera une technique de type Newton, malheureusement plus délicate à mettre en œuvre.

Remarque : le critère J est minimal pour $\theta = \theta_{\text{opt}}$, mais ce caractère d'optimalité ne doit pas cacher le fait que θ_{opt} ne peut être égal à θ_{vrai} à cause des erreurs, perturbations, etc... De plus il risque d'être systématiquement différent de θ_{vrai} à cause d'un biais dû au non respect d'hypothèses strictes sur la nature des erreurs de mesure (ce qui est fréquemment le cas dans l'emploi de la régression linéaire [9, 11, 12]).

1.2. Précision de l'estimateur

1.2.1. Incertitude de l'estimation

Après la détermination de l'optimum θ_{opt} , le physicien doit se poser la question de la précision de cette estimation [10, 12]. Pour mettre en évidence cette notion, on utilise à nouveau le critère J et sa représentation graphique (figures 4 et 5) en effectuant une relation entre les deux domaines : mesures et critère.

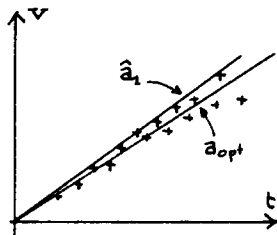


Figure 4

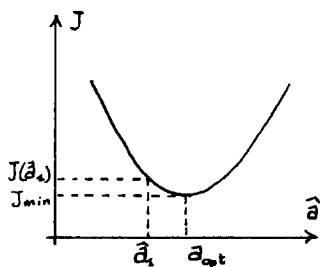
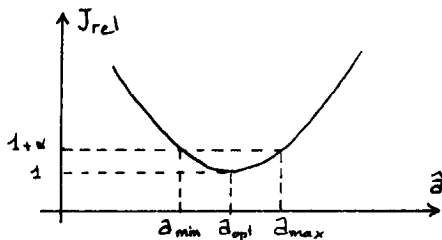


Figure 5

Le choix $\hat{a} = a_{opt}$ est-il impératif ou bien $\hat{a} = \hat{a}_1$ peut-il convenir, compte-tenu des erreurs de mesure ? La notion de précision apparaît alors comme une imprécision, une incertitude dans le choix de \hat{a} . Si \hat{a}_1 donne autant de satisfaction que \hat{a}_{opt} , c'est qu'il y a incertitude dans l'estimation de \hat{a} . Le test de plusieurs valeurs de \hat{a} permet de mettre en évidence cette notion.

Pour quantifier les comparaisons, il est préférable de normaliser J . On considère donc $J_{rel} = J/J_{min}$ qui est tel que $J_{rel min} = 1$. On choisit alors $J_{rel max} = 1 + \alpha$, tel que J_{max} corresponde à une détérioration visible de l'approximation mesures/modèle.

Figure 6 : $J_{max} = (1 + \alpha) J_{min}$

Alors pour $J(\hat{a}) < J_{max}$, \hat{a} est réputé acceptable ce qui définit le domaine d'incertitude :

$$a_{min} < \hat{a} < a_{max}$$

1.2.2. Corrélation des estimations

Lorsqu'on estime simultanément deux paramètres, tels que a et v_0 dans $v = at + v_0$, le problème devient plus délicat car il apparaît un couplage entre les estimations de \hat{a} et \hat{v}_0 . Le critère J est une fonction des 2 paramètres et sa représentation est alors celle des courbes

isocritères ($J = \text{cte}$) qui sont l'équivalent des courbes de niveau (figure 7). Dans le cas où le modèle est linéaire par rapport aux paramètres, les courbes isocritères sont des ellipses.

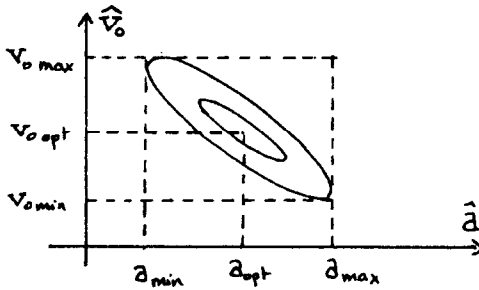


Figure 7

Ceci montre que le domaine d'incertitude n'est pas simplement caractérisé par la double inégalité suivante (qui définit un domaine rectangulaire) :

$$a_{\min} < \hat{a} < a_{\max}$$

$$v_{0 \min} < \hat{v}_0 < v_{0 \max}$$

mais par l'inégalité sur J (qui définit un domaine elliptique) :

$$J(\hat{a}, \hat{v}_0) < J_{\max} = (1 + \alpha) J_{\min}$$

Remarque : la démarche précédente est surtout basée sur le graphisme et l'interprétation des courbes obtenues. L'étude analytique de la méthode des moindres carrés est toutefois nécessaire pour aller plus loin : estimateur dans le cas général, matrice de covariance et hypothèses stochastiques afférentes, interprétation de la corrélation à partir de la covariance, biais éventuel de l'estimateur, cas non linéaire, etc...

2. MÉTHODES NUMÉRIQUES ET SCIENCES PHYSIQUES

Dans le cas de la modélisation expérimentale, l'ordinateur est utilisé comme outil graphique et de calcul. Les méthodes mathématiques mises en œuvre sont relativement élémentaires, du moins dans l'approche préconisée ci-dessus. Dans le cas des méthodes numériques, on utilise encore l'ordinateur pour sa vitesse et sa puissance de calcul, mais on fait plus porter l'accent sur «l'objet mathématique» concerné.

L'intérêt pédagogique est de transformer des problèmes mathématiques complexes en problèmes approchés équivalents ne faisant intervenir que des additions et des multiplications algébriques, donc directement accessibles à des élèves du secondaire.

2.1. Intégration d'équations différentielles

Considérons à titre d'exemple introductif, la charge d'un condensateur C à travers une résistance R (figure 8).

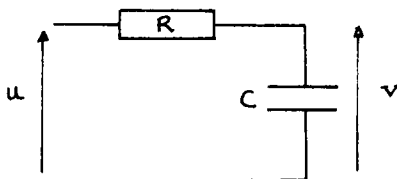


Figure 8

Celle-ci est régie par l'équation différentielle du premier ordre suivante :

$$RC \, dv/dt + v(t) = u(t)$$

2.1.1. Méthode d'Euler

Si en classe de première l'élève n'a pas encore étudié les méthodes analytiques d'intégration des équations différentielles, il connaît par contre la définition de la dérivée :

$$v'(t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{v(t + \delta t) - v(t)}{\delta t}$$

La technique consiste à remplacer dv/dt par $(v_{k+1} - v_k)/\delta t$ (avec $t = k\delta t$), et donc à transformer l'équation différentielle en une équation aux différences qui peut s'écrire :

$$v_{k+1} = v_k (1 - \delta t/RC) + u_k \delta t/RC$$

Cette équation ne fait appel qu'à des opérations élémentaires telles que l'addition et la multiplication. Un élève de première peut donc utiliser ce processus d'intégration numérique, basé sur la même méthodologie que ceux employés dans les logiciels de conception assistée par ordinateur.

En modélisation expérimentale, pour estimer la constante de temps $\theta = RC$, il faut posséder une solution explicite $v_{\text{mod}}(t)$. Dans le cas de

la décharge, on choisirait ainsi $v_{\text{mod}}(t) = E \exp(-t/\theta)$. Cependant il s'agit là d'un cas très particulier : lorsque l'excitation est quelconque (suite de charges et de décharges par exemple), $v_{\text{mod}}(t)$ ne possède pas d'expression analytique simple ou calculable. Celle-ci est alors obtenue par une méthode numérique : on calcule $v_{\text{mod}}(t) = v_k$ avec $k = t/\delta t$ à partir de la valeur estimée $\hat{\theta}$ de la constante de temps du circuit RC.

On peut ainsi dès la classe de première estimer une constante de temps sans connaissance mathématique a priori. L'informatique et les méthodes numériques permettent donc dans ce cas une réelle innovation pédagogique.

2.1.2. Méthode de Runge-Kutta

Pour améliorer la précision, il faut employer une meilleure approximation de la dérivée (en prenant en compte plus de termes dans les développements en série de Taylor). On est ainsi conduit à utiliser la famille de méthodes dite de Runge-Kutta, la plus connue étant celle d'ordre 4 [3, 4]. On utilisera obligatoirement cette méthode pour les équations différentielles d'ordre supérieur à 1. On l'emploiera par exemple en électricité (circuit RLC du 2ème ordre) en mécanique (mouvement d'un pendule pesant avec frottements), en chimie (cinétique de réactions) etc...

Les équations différentielles sont omniprésentes en sciences physiques, les applications sont évidemment innombrables et la méthode de Runge-Kutta est un des outils fondamentaux du physicien.

2.2. Autres méthodes numériques

La liste qui suit n'est pas exhaustive mais essaie seulement de refléter les méthodes les plus fréquemment utilisées en pratique pédagogique [3, 4, 7, 8]. Insistons ici sur l'importance de connaître les limitations de ces méthodes pour ne pas en faire un emploi abusif et correctement exploiter les logiciels existants.

2.2.1. Dérivation et intégration numérique

Ainsi, pour estimer une vitesse ou une accélération à partir de l'enregistrement de la position d'un mobile, on pourra utiliser une dérivation numérique :

$$df/dt = (f_{k+1} - f_k)/\delta t$$

$$\text{et} \quad d^2f/dt^2 = (f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1})/\delta t^2$$

En fait, cette technique est mise en défaut par les erreurs de mesure, surtout pour l'ordre 2. Elle s'applique évidemment à des valeurs exactes obtenues par voie numérique (calcul par fonction analytique ou par méthode de Runge-Kutta par exemple).

Pour évaluer le travail d'une force, l'énergie emmagasinée dans un condensateur ou une bobine, on peut utiliser une méthode d'intégration numérique. Pour cela, on calcule par approximation l'aire de la surface définie par la courbe (ou la série de points expérimentaux) et l'axe des abscisses. On utilise fréquemment trois types de méthodes : rectangles (approximation en escalier), trapèzes (approximation linéaire entre deux points successifs) et de Simpson (approximation parabolique).

A la différence de la dérivation, l'intégration numérique est nettement moins sensible aux erreurs de mesure.

2.2.2. Résolution d'équations

L'étude d'un système peut également conduire à la recherche de zéros de fonctions ou de solutions de systèmes d'équations. C'est le cas par exemple en électrocinétique avec la recherche de points de fonctionnement d'un dipôle, où l'étude d'un circuit par les lois de Kirchoff. Plusieurs méthodes numériques sont ici utilisables, et elles ne seront qu'évoquées.

Pour la recherche de zéros, on peut employer soit la technique dichotomique qui est élémentaire, soit la méthode dite de Newton. Pour la résolution d'un système d'équations linéaires, on utilisera la méthode du pivot qui est basée sur la méthode de substitution. Pour certains types de systèmes linéaires, tels que ceux rencontrés dans la méthode des moindres carrés, la méthode du pivot est mise en défaut : on lui préférera dans ce cas celle de Choleski (ou de la racine carrée).

2.2.3. Interpolation, lissage

Si l'on dispose d'un ensemble fini de N valeurs, il est possible d'obtenir des valeurs intermédiaires en les calculant à l'aide d'un polynôme vérifiant ces N valeurs. Cette technique convient pour des ensembles de points qui ne sont pas entachés d'incertitude.

Sinon, la technique de lissage ou d'approximation polynômiale, basée sur la méthode des moindres carrés, permet de déterminer le polynôme approchant aux mieux les N valeurs. L'interpolation ainsi réalisée peut prendre en compte des erreurs de mesure. En dérivant

analytiquement ce polynôme, on a aussi accès à une estimation de la dérivée moins sensible aux erreurs de mesure.

2.2.4. Transformée de FOURIER

Citons enfin l'existence d'un algorithme dit de transformée de Fourier rapide, qui permet d'obtenir des spectres en des temps relativement courts. Un des domaines d'application privilégié est évidemment l'électronique pour l'analyse fréquentielle des signaux complexes.

3. CONCLUSION

Nous avons essayé de présenter ci-dessus la contribution du calcul numérique par ordinateur à l'enseignement des sciences physiques en accordant d'abord une large place à l'analyse des données sous l'angle de la modélisation expérimentale, puis en brossant un panorama des techniques d'analyse numérique.

Les différentes méthodes numériques imaginées par des chercheurs ou des ingénieurs ne peuvent pas être appliquées directement à l'enseignement. Une adaptation est évidemment nécessaire concernant le niveau des élèves, mais la démarche pédagogique doit aussi conduire à une redéfinition de l'outil numérique. Cela nous semble plus particulièrement nécessaire en modélisation expérimentale où un effort considérable reste à accomplir tant sur le plan de la recherche pédagogique que des applications logicielles pour le lycée.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] U.d.P.-INRP : Actes des quatrièmes Journées Sciences Physiques et Informatique, U.d.P., 1990, 411 p.
- [2] U.d.P., Acquisition et analyse de données, U.d.P., 1990, 128 p.

Analyse numérique

- [3] J.P. NOUGIER, Méthodes de calcul numérique, Masson, 1983.
- [4] M. MENETRIER, Informatique et sciences physiques, Tec et Doc LAVOISIER/Langage et Informatique, 1988.

Programmation Non Linéaire/Optimisation

- [5] R. BOUDAREL, J. DELMAS et P. GUICHET, Commande optimale des processus/Tome II, Dunod, 1968.
- [6] D.M. HIMMELBLAU, Applied non linear programming, Mc. GRAW HILL 1972.

Traitement des données

- [7] J. MAX, Méthodes et techniques du traitement du signal, Masson, 1972
- [8] M. LABARRERE, J.P. KRIEF et B. GIMONET, Le filtrage et ses applications, Cepadues Éditions, 1982

Méthode des moindres carrés

- [9] D. DUMAS DE RAULY, L'estimation statistique, Gauthier-Villars, 1966.

Modélisation expérimentale/Identification

- [10] J. RICHALET, A. RAULT et R. POULIQUEN, Identification des processus par la méthode du modèle, GORDON and BREACH, 1971
- [11] P. DE LARMINAT et Y. THOMAS, Automatique des systèmes linéaires Tome II, Flammarion, 1977
- [12] J.C. TRIGEASSOU, Recherche de modèles expérimentaux assistée par ordinateur, Tec et Doc Lavoisier/Langage et Informatique, 1988.