



HAL
open science

Évaluations optimales des inconnues d'un système statistique non linéaire. I. Principe et théorie

Max Tournarie

► **To cite this version:**

Max Tournarie. Évaluations optimales des inconnues d'un système statistique non linéaire. I. Principe et théorie. *Journal de Physique*, 1969, 30 (10), pp.737-751. 10.1051/jphys:019690030010073700 . jpa-00206836

HAL Id: jpa-00206836

<https://hal.science/jpa-00206836>

Submitted on 4 Feb 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

LE JOURNAL DE PHYSIQUE

ÉVALUATIONS OPTIMALES DES INCONNUES D'UN SYSTÈME STATISTIQUE NON LINÉAIRE

I. PRINCIPE ET THÉORIE

Par MAX TOURNARIE,

Service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique,
Centre d'Études Nucléaires de Saclay, B.P. n° 2, 91-Gif-sur-Yvette.

(Reçu le 20 mars 1969.)

Résumé. — On cherche les meilleures évaluations d'inconnues dont on ne connaît que des combinaisons non linéaires avec incertitude. On propose une application non linéaire de l'espace affine des inconnues et des observations dans un espace métrique tel que les densités de probabilité y deviennent normales réduites. La solution correspond au point représentatif le plus proche de l'origine qui respecte les liaisons et les contraintes. Il n'est pas nécessaire d'inverser le système d'équations.

Abstract. — We are searching the best estimates of n unknowns of which N implicit non linear equations are known only with errors. Non linear applications from the space of the unknowns and from the space of the observations into a space Σ with $N + n$ dimensions are proposed such as the probability density function become normal reduced independent. The solution is connected with the representative point which is the nearest of the Σ space origin and which belongs to the n -dimensional hyper-surface defined by the N non linear equations. So, we avoid to inverse the equations.

I. INTRODUCTION

Dans tous les domaines des sciences exactes, on trouve des schémas décrivant un grand nombre d'observations avec un petit nombre de paramètres explicatifs.

Il s'agit avec ce grand nombre d'observations de trouver une bonne évaluation des paramètres inconnus. Le chercheur dispose d'une suite comportant un nombre n_y non aléatoire de valeurs obtenues sans calcul que nous appelons les observations (chaque $j^{\text{ième}}$ observation sera notée y_j).

A partir de cette suite, on cherche à approcher des valeurs des n_x paramètres inconnus x_1, x_2, \dots, x_{n_x} . Pour cela, on exploite la description formulée du phénomène : si l'on admet que la description est correcte, chaque observation devrait valoir :

$$\tilde{y}_j = f(j; x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n_x}) \quad j \in 1, n_y. \quad (1)$$

On disposerait ainsi de n_y équations pour n_x inconnues avec $n_y > n_x$. Si les observations étaient exactes, il suffirait de choisir n_x observations formant un système non singulier pour obtenir un nombre fini de solutions dont une serait la bonne.

Remarquons d'abord que les solutions ne seraient pas faciles à obtenir si les y_j ne sont pas reliés aux x_i par des relations linéaires.

Ensuite, parmi les différentes solutions trouvées,

seules des considérations extérieures au système permettaient de choisir la bonne solution. On rejeterait d'abord les solutions comportant des x_i inacceptables (par exemple : concentrations supérieures à 100 % ou négatives), puis les solutions improbables pour ne garder que la plus probable. Déjà interviendrait le rôle des informations *a priori* sur les inconnues et la notion de probabilité des inconnues.

Toujours si les observations étaient exactes, les autres observations calculées à partir des inconnues précédemment déterminées coïncideraient avec les observations réelles, sauf peut-être si l'on avait choisi une mauvaise solution. On pourrait d'ailleurs être tenté de construire un procédé d'élimination des solutions parasites fondé sur cette possibilité. Il faut toutefois l'abandonner puisque l'hypothèse de l'exactitude absolue des observations n'est jamais réalisée.

Il résulte de cette circonstance qu'il n'existe pas de relation rigoureuse reliant les observations aux inconnues. On ne pourra que s'approcher des inconnues au moyen d'évaluations obtenues par des méthodes fondées sur des considérations probabilistes.

Comment savoir d'une part calculer « au mieux » des évaluations des inconnues connaissant un certain nombre de résultats expérimentaux nécessairement entachés d'erreurs, d'autre part estimer l'incertitude sur chacune de ces évaluations ?

Les aspects de ce problème diffèrent totalement selon la forme de la fonction reliant aux inconnues les valeurs centrales \tilde{y}_j des observations.

Nous nous attacherons de façon plus précise à la résolution des problèmes de la classe « continue » et de la catégorie « non linéaire, non linéarisable ».

II. CLASSIFICATION DES PROBLÈMES

1. **Classes.** — On distingue deux classes de problèmes suivant que les inconnues sont prises sur un ensemble discret de valeurs ou sur un ensemble continu. En fait, toutes les mesures numériques appartiennent à un ensemble de valeurs discrètes. Mais on peut se placer à un point de vue macroscopique et décrire le comportement d'un milieu continu, en fixant son attention non sur les valeurs individuelles, mais sur un petit volume du milieu. Le langage ne fait plus intervenir les positions des valeurs discrètes, mais l'élément de volume considéré doit alors contenir un nombre suffisamment grand de points pour permettre d'évaluer des valeurs moyennes locales. On peut ainsi définir une densité de probabilité dépendant de n coordonnées curvilignes quelconques. Nous nous intéressons donc ici uniquement au cas des inconnues à valeurs continues.

Il s'agit déjà là d'une distinction fondée sur une conception théorique. Nous définirons donc tout de suite le terme « à valeurs pratiquement continues » sur un concept d'information. Une grandeur est dite « à valeurs discrètes » si elle ne peut prendre qu'une valeur dans le domaine d'incertitude qui l'entoure. Le domaine d'incertitude est défini par les deux quartiles centraux.

Une grandeur est dite « à valeurs pratiquement continues » si elle peut prendre un grand nombre de valeurs dans son domaine d'incertitude.

Ainsi, sur une calculatrice à cinq chiffres :

$$x = 1\,234,5 \pm 0,1$$

est une grandeur discrète, alors que $x = 1\,234,5 \pm 11,1$ est une grandeur pratiquement continue. Notre définition a le défaut d'être liée à la structure matérielle des ordinateurs. Elle permet toutefois de savoir directement si un problème peut être traité ou non par notre méthode sur un ordinateur donné.

2. **Catégories.** — Un autre point de vue consiste à classer les problèmes suivant la forme mathématique de la dépendance entre les inconnues et les valeurs centrales des observations. Cette dépendance peut en effet être soit linéaire, soit non linéaire.

A. **PROBLÈMES LINÉAIRES.** — Ils sont décrits par l'équation matricielle :

$$\tilde{\mathbf{y}}^* = \mathbf{A}\mathbf{x}^* \quad (2)$$

Si n_x est le nombre d'inconnues et n_y le nombre d'observations, la notation \mathbf{x}^* ou \mathbf{y}^* représente respectivement les vecteurs colonnes :

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_x} \end{bmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n_y} \end{bmatrix}.$$

$\tilde{\mathbf{y}}^*$ est le vecteur dont les composantes sont les valeurs centrales respectives des composantes de \mathbf{y}^* . \mathbf{A} est alors une matrice rectangulaire à coefficients constants à n_x colonnes et n_y lignes.

Ces problèmes peuvent être stationnaires ou non.

a) *Problèmes stationnaires.* — Nous appelons problèmes stationnaires les problèmes où une translation des indices des inconnues se traduit par une translation des indices des valeurs centrales des observations. Cette propriété se formule :

$$\tilde{y}_{j+k} = \sum_i A_{ji} x_{i+k} \quad (3)$$

On montre aisément que cela implique les relations :

$$A_{ji} = A_{j+k, i+k} \quad \forall k. \quad (4)$$

La matrice \mathbf{A} est donc formée de lignes dont chacune se déduit de la précédente par translation d'un indice (matrice bande). Une seule ligne suffit ainsi pour la connaître tout entière et l'on peut écrire :

$$\tilde{y}_j = \sum_i a_{j-i} x_i \quad (5)$$

On dit alors que \mathbf{A} est un filtre.

Wiener (1942) [5] a montré qu'on pourrait obtenir une bonne évaluation des x_i en admettant qu'ils étaient des signaux aléatoires normaux et que les erreurs expérimentales formaient un bruit normal. La qualité de l'évaluation était mesurée par la distance probable entre le signal évalué \mathbf{z}^* et le signal vrai \mathbf{x}^* .

Pour obtenir \mathbf{z}^* , Wiener utilisait un filtre sur les observations, qui, traduit dans notre formalisme, s'écrit :

$$z_k = \sum_j b_{k-j} y_j \quad (6)$$

De plus, ce filtre était choisi seulement parmi ceux qui sont réalisables physiquement, c'est-à-dire tels que :

$$b_{k-j} = 0 \quad \text{pour} \quad k < j. \quad (7)$$

Tournarie (1956) [7] a montré qu'on pouvait notablement simplifier les calculs si l'on acceptait d'employer un filtre non physique, ce qui est possible s'il est réalisé par ordinateur après collection de toutes les observations.

Toutefois ces méthodes étaient encore fondées sur l'hypothèse de la connaissance d'observations en un nombre illimité de points.

Tournarie (1959) [10] a pallié en partie ces inconvénients en montrant que, dans le cas où les observations n'évoluaient plus aux bornes de l'intervalle d'exploration, il était équivalent de travailler sur des systèmes à permutation circulaire ou des systèmes infinis.

On peut ainsi traiter un certain nombre de problèmes approximativement stationnaires, ou évoluant peu sur les bords de l'intervalle d'observation (comme par exemple la correction de l'élargissement instrumental sur des ensembles de raies spectrales).

Cependant, très peu de problèmes sont strictement linéaires stationnaires. Avec l'accroissement des possibilités des calculateurs numériques, l'intérêt des méthodes précédentes ne compense plus l'inexactitude des hypothèses de base lorsqu'on veut traiter des cas peu stationnaires.

b) *Problèmes non stationnaires.* — La matrice rectangulaire \mathbf{A} ne présente plus alors la propriété de bande (4).

Pour que le système (2) possède une solution définie, il faut qu'il existe dans \mathbf{A} au moins un mineur $n_x \times n_x$ dont le déterminant ne soit pas nul. En général, une dimension de \mathbf{A} est supérieure à n_x , et il n'existe pas de solution mathématique au système : $\mathbf{y}^* = \mathbf{A}\mathbf{x}^*$.

A. M. Legendre (1806) [1] imagina une méthode de résolution de ces systèmes, méthode qu'il a appelée « Méthode des moindres carrés ».

K. F. Gauss (1809, 1810, 1821) [2, 3, 4] donne les premières bases probabilistes à cette méthode en la dotant d'une justification statistique fondée sur l'hypothèse que les erreurs aléatoires faites sur les observations suivent une loi de Laplace.

Cette méthode consiste à minimiser la distance dans l'espace H des observations entre l'extrémité du vecteur \mathbf{y}^* des observations et l'extrémité du vecteur \mathbf{Az}^* des valeurs centrales recalculées à partir des évaluations \mathbf{z}^* des inconnues.

La solution explicite conduit à l'inversion d'une matrice d'ordre n_x qui résume en quelque sorte l'information donnée par l'expérience sur les différentes inconnues. En pratique, cette matrice est fréquemment pseudo-singulière. Son inversion entraîne beaucoup d'erreurs d'arrondi, et surtout, certains termes de la matrice de covariance sont très grands.

De plus, les « méthodes des moindres carrés » et leurs variantes sont incapables d'inclure rationnellement et d'exploiter systématiquement les informations *a priori* quelle que soit leur nature.

Tournarie (1964 b, 1964 c) [13, 14] a montré comment introduire l'information *a priori* sur les inconnues dans les systèmes linéaires non stationnaires en les considérant comme des tirages de variables aléatoires normales de caractéristiques connues.

Lorsqu'on prend en compte les informations *a priori*, l'estimateur optimal auquel on est conduit possède alors d'intéressantes propriétés :

1) Il est optimal pour chaque inconnue et donc pour toute forme linéaire des inconnues.

2) L'augmentation de l'erreur statistique sur une inconnue à la suite de l'introduction d'inconnues auxiliaires supplémentaires est largement inférieure à l'augmentation qui en résulterait dans la méthode des moindres carrés.

3) Lorsque l'information préalable sur une inconnue consiste en une certitude, il est facile d'en tenir compte sans modifier le formalisme. On écrit que l'écart statistique *a priori* est nul sur cette inconnue. Ceci n'entraîne aucune singularité dans la matrice à inverser et la valeur de cette inconnue se trouve bloquée à la valeur initiale certaine.

4) Enfin, dans le cas d'observations indépendantes successives, il est possible d'effectuer l'évaluation optimale des inconnues au fur et à mesure qu'est connue chaque observation. Le résultat est identique à celui qu'on obtiendrait par un traitement global des observations (Tournarie, 1968 b) [24].

B. PROBLÈMES NON LINÉAIRES. — La dépendance inconnues-observations centrales se présente sous la forme d'un opérateur non linéaire :

$$\tilde{\mathbf{y}}^* = \mathcal{A}(\mathbf{x}^*). \tag{8 a}$$

On peut également dans cette catégorie distinguer deux cas : problèmes « linéarisables » et problèmes « non linéarisables », bien qu'en pratique la frontière entre ces deux cas ne soit pas nettement précisée.

a) *Problèmes linéarisables.* — La linéarisation permet de résoudre le problème par itération, chaque cycle étant constitué des opérations suivantes :

— Développement de $\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$ en série de Taylor au voisinage du point \mathbf{x}_h^* dans l'espace des inconnues, c'est-à-dire :

$$\tilde{\mathbf{y}}^* = \mathcal{A}(\mathbf{x}_h^*) + \sum_j \frac{\partial \mathcal{A}(\mathbf{x}_h^*)}{\partial x_j} \{\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_h^*\}_j + \dots \tag{9}$$

où $\{\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_h^*\}_j$ désigne la $j^{\text{ième}}$ composante du vecteur $\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_h^*$.

— Résolution en \mathbf{x}^* du système linéaire de n_y équations à n_x inconnues défini par le développement précédent arrêté aux termes linéaires. Cette résolution peut se faire soit par la méthode des moindres carrés, ou mieux par la méthode de l'opérateur optimal (Tournarie, 1964 a [12]).

Certains auteurs (Gaugenot, Guillou et Lago, 1961 [11]) ont remarqué que les termes supérieurs du développement de \mathcal{A} contiennent des facteurs linéaires en \mathbf{x}^* . Ils tiennent compte ainsi des dérivées secondes, ce qui aurait l'avantage de faire converger vers la solution. En revanche, cette méthode diminue le rayon de convergence (Bibian, 1966 [19]) et entraîne des calculs beaucoup plus importants en temps et en place puisqu'ils nécessitent la connaissance et la mise en réserve des $\frac{1}{2} n[n - 1]$ dérivées secondes.

b) *Problèmes non linéarisables.* — Certains problèmes présentant un très court rayon de convergence ne se prêtent pas ou du moins se prêtent mal à la linéarisation.

Tel est le cas par exemple de la détermination des intensités, positions et largeurs des composantes d'un multiplet. Les dérivées partielles de l'intensité en un

point par rapport aux inconnues présentent des changements de signe qui peuvent aboutir à des pas dans le mauvais sens sur certaines inconnues et conduire à des divergences.

Nous avons été conduits ainsi à chercher une méthode ne présentant pas les inconvénients de la linéarisation et capable d'évaluer « au mieux » les paramètres de n'importe quelle loi théorique, par généralisation de la méthode de l'opérateur optimal.

La méthode de l'opérateur optimal est utilisée pour résoudre des systèmes linéaires non stationnaires et des systèmes non linéaires linéarisables par transformation linéaire tangente.

Elle présente quelques caractéristiques valables qui se retrouveront sous une autre forme dans la méthode plus générale que nous présenterons dans cette publication :

1) Les erreurs statistiques des observations sont engendrées par des variables aléatoires qui suivent une loi normale.

2) Les inconnues sont considérées comme des tirages de fonctions aléatoires dont la loi de répartition est elle-même normale. La connaissance de cette loi combinée avec celle des observations permet une évaluation beaucoup plus précise des inconnues.

3) Les calculs sont très simplifiés et la solution est unique du fait que, dans une loi normale : 1) l'espérance mathématique, le mode et la médiane sont confondus ; 2) ces propriétés se conservent par combinaison linéaire.

4) La solution est invariante vis-à-vis des changements de système d'inconnues ou de système d'observations.

Ce sont ces avantages que l'on a cherché à conserver dans les systèmes non linéaires en formulant tout le problème à partir d'un vecteur aléatoire qui suit une loi de probabilité normale réduite à plusieurs dimensions.

Il faut pour cela expliciter un schéma général de la suite des opérations, des phénomènes et des conceptions mis en jeu au cours d'une mesure.

Après avoir étudié la structure générale d'une chaîne de mesure, nous définissons un objectif par un certain critère de qualité que nous chercherons à rendre extrémal.

III. CHAÎNE DE MESURE

La structure essentielle la plus courante d'une chaîne de mesure est décrite par le schéma de la figure 1 (Tournarie, 1965 [15]).

Elle comprend un appareil fournissant, à partir des inconnues \mathbf{x}^* et de paramètres de commande \mathbf{p}^* , des observations \mathbf{y}^* répondant à une relation connue de la forme :

$$\tilde{\mathbf{y}}^* = \mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{x}^*) \quad (8b)$$

où $\tilde{\mathbf{y}}^*$ est la valeur centrale de \mathbf{y}^* dont nous allons voir la signification.

Chaque observation est en effet perturbée et l'ensemble de n_y perturbations résulte d'une injection connue (application non nécessairement linéaire) de l'espace métrique de variables aléatoires normales $\boldsymbol{\sigma}^*$ dans l'espace affine des observations, application symbolisée par $\mathcal{Y}(\boldsymbol{\sigma}^*)$. Nous pouvons effectivement poser que chaque composante de $\boldsymbol{\sigma}^*$ suit une loi de Laplace-Gauss normale d'espérance nulle et d'écart type unité puisque \mathcal{Y} n'est pas nécessairement linéaire. On a donc :

$$\boldsymbol{\eta}^* = \tilde{\mathbf{y}}^* + \mathcal{Y}(\boldsymbol{\sigma}^*) \quad (10)$$

$$\mathbf{y}^* = \tilde{\mathbf{y}}^* + \mathcal{Y}(\mathbf{s}^*) \quad (11)$$

où \mathbf{y}^* est un tirage de $\boldsymbol{\eta}^*$, \mathbf{s}^* un tirage de $\boldsymbol{\sigma}^*$, et où :

$$\mathcal{Y}(\mathbf{o}^*) = \mathbf{o}^* \quad (12)$$

ce qui définit la notion de valeur centrale : $\tilde{\mathbf{y}}^*$ est la valeur que prend \mathbf{y}^* si $\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*) = \mathbf{o}^*$.

L'opérateur \mathcal{Y} peut être dans certains cas une application linéaire représentée par une matrice carrée \mathbf{Y} . On a alors un « bruit laplacien ». Si de plus cette matrice est diagonale, on a un « bruit blanc laplacien ».

Le vecteur \mathbf{x}^* des inconnues a des composantes de valeurs bien déterminées mais ignorées. Toutefois le domaine acceptable pour les évaluations n'est pas quelconque et leur position à l'intérieur de ce domaine est plus ou moins vraisemblable. On peut tenir compte de ces informations en considérant \mathbf{x}^* comme un tirage d'un vecteur aléatoire $\boldsymbol{\xi}^*$ possédant une loi de probabilité donnée *a priori*. Cette loi est caractérisée par une

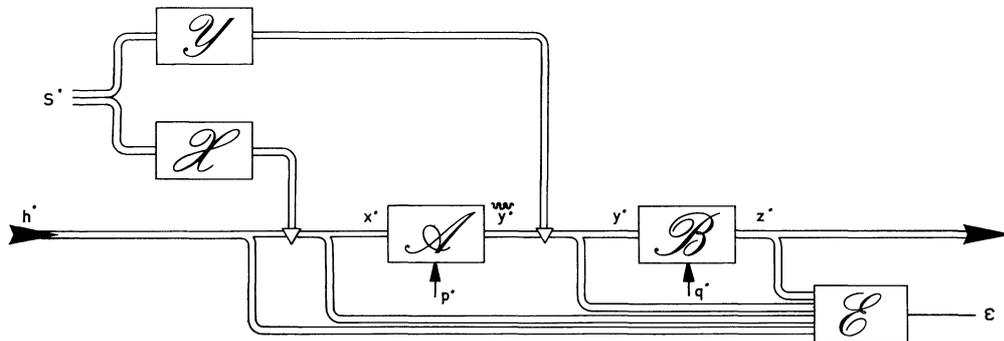


FIG. 1. — Schéma général d'une chaîne de mesure.

injection connue (application non nécessairement linéaire) de l'espace des variables aléatoires σ^* dans l'espace affine des inconnues symbolisées par :

$$\xi^* = h^* + \mathcal{X}(\sigma^*) \tag{13}$$

avec :

$$\mathcal{X}(\sigma^*) = \sigma^* \tag{14}$$

et où h^* est la valeur centrale de ξ^* , d'où :

$$x^* = h^* + \mathcal{X}(s^*). \tag{15}$$

Ce schéma de génération des inconnues permet par exemple d'écrire qu'une concentration relative sera toujours comprise entre zéro et un, en choisissant \mathcal{X} tel que $h + \mathcal{X}(-\infty) = 0$ et $h + \mathcal{X}(\infty) = 1$, qu'une énergie sera toujours positive ou nulle, qu'une distance interatomique ne peut descendre en deçà d'un certain minimum, etc. Ces informations correspondent à une densité de probabilité de $\mathcal{X}(\sigma^*)$ nulle en dehors des intervalles permis.

Ce point de vue change la signification de \tilde{y}^* qui doit maintenant être considérée comme la valeur centrale liée à la probabilité conditionnelle de y^* sachant que ξ^* vaut x^* .

Les évaluations z^* des inconnues x^* sont obtenues à partir des observations y^* par un opérateur \mathcal{B} :

$$z^* = \mathcal{B}(q^*, y^*) \tag{16}$$

où q^* représente les paramètres caractérisant l'opérateur \mathcal{B} , paramètres que l'on choisira pour avoir la meilleure évaluation (la qualité de cette évaluation sera mesurée par un certain critère). q^* peut être par exemple les limites de la bande passante si \mathcal{B} est un filtre, ou bien les coefficients B_{ij} de la matrice B si \mathcal{B} est une application linéaire de l'espace des observations dans l'espace des inconnues, ou même comme dans cette publication directement les évaluations des inconnues.

Puisque y^* est un tirage d'une variable aléatoire η^* , z^* est lui-même un tirage d'une variable aléatoire ζ^* telle que :

$$\zeta^* = \mathcal{B}(q^*, \eta^*). \tag{17}$$

IV. CHOIX DE L'OBJECTIF

1. **Choix du critère de qualité.** — *a)* Le critère de qualité doit tout d'abord traduire exactement ce que l'on recherche. En particulier, lorsqu'on cherche non pas la meilleure représentation graphique des expériences, mais la meilleure évaluation des inconnues, *il faut que le critère soit extrémal pour la meilleure approche des inconnues et non pas pour le meilleur accord avec les observations.*

b) De plus, les résultats fournis par le critère doivent être aussi peu dépendants que possible de la formulation qu'on en donne.

c) Ensuite, le critère doit conduire à des équations que l'on peut résoudre avec un volume raisonnable de calculs.

d) Enfin, il doit être tel que, appliqué à un système linéaire, il permette de retrouver les mêmes résultats que l'opérateur optimal.

e) Remarquons pour terminer que le critère de qualité sera toujours un scalaire car si l'on voulait optimiser plusieurs quantités à la fois, le problème n'aurait pas, en général, de solution dans le cas d'un système non linéaire.

2. Définition de la fonction scalaire de coût. —

Nous allons donc définir une fonction d'autant plus grande que les évaluations z^* seront vraisemblablement ou probablement plus éloignées des inconnues x^* et telle que les évaluations correspondant au minimum de cette fonction répondent au critère de qualité choisi.

Examinons d'abord comment se présente le critère de qualité dans un système linéaire. On peut le décrire dans plusieurs espaces différents.

Dans l'espace H des observations, il faudrait pouvoir expliciter la densité de probabilité des inconnues au point z^* d'après l'écart entre les observations calculées avec z^* et avec x^* . Ceci demanderait une sorte d'inversion de l'opérateur \mathcal{A} , ce qui est en général impossible. Ceci exclut l'énoncé du critère de qualité dans l'espace des observations :

a) Dans l'espace Ξ des inconnues, le critère optimal consiste à trouver la forme linéaire des observations :

$$z^* = b^* + B y^* \tag{18}$$

qui minimise l'espérance mathématique d'une forme quadratique des écarts à la solution exacte. Soit :

$$[z^* - x^*] M [z^* - x^*] \tag{19}$$

cette forme quadratique. Son espérance est :

$$\varepsilon(b^*, B, M) = \int_{\Xi} [z^* - x^*] M [\zeta^* - \xi^*] p(\xi^*, \eta^*) d\nu(\xi^*, \eta^*) \tag{20}$$

où M est une matrice définie positive. On démontre (1964 c) [14] que ε est minimal pour b^* et B qui sont indépendantes de la forme quadratique M choisie lorsque les x^* et les y^* sont les tirages de vecteurs aléatoires normaux ξ^* et η^* .

Les évaluations optimales z_0^* qui en résultent sont donc indépendantes de la matrice M .

b) Dans l'espace Σ du générateur de bruit σ^* , le critère optimal consiste à se donner une séquence z^* d'estimations de x^* , d'après laquelle on peut remonter à un état s^* de σ^* . Cet état s^* (noté ainsi pour le distinguer du vrai s^* puisque z^* diffère de x^*) est donc une fonction de z^* . On choisit alors z_0^* tel que l'état s_0^* dont z_0^* résulterait corresponde à la probabilité maximale de σ^* qui s'écrit :

$$p(s^*) = [2\pi]^{-[n_x + n_y]/2} e^{-3s^*/2}. \tag{21}$$

Les deux points de vue conduisent, dans un système linéaire, aux mêmes évaluations z_0^* . On montre d'ailleurs aisément qu'ils sont équivalents.

Examinons maintenant comment se présentent les

différentes formulations précédentes dans le cas d'un système non linéaire.

Cherchons d'abord à minimiser l'espérance mathématique d'une forme quadratique des écarts entre les évaluations et les inconnues. Les calculs sont inextricables : on est conduit à résoudre un système de dérivées d'intégrales n -uples. D'autre part, les résultats dépendraient de la forme quadratique choisie. Ainsi les points 2 b) et 2 c) ne seraient pas vérifiés. Au moyen de calculs difficiles, on aboutirait à des résultats discutables. De plus, si les densités de probabilité ne sont pas normales, l'existence même de l'espérance mathématique est douteuse.

Prenons maintenant la description dans l'espace Σ du bruit de fond générateur laplacien. Nous allons chercher un \mathbf{z}^* tel que la densité de probabilité au point \mathbf{s}^* soit maximale (ce qui revient à minimiser par rapport à \mathbf{z}^* l'expression ${}^*ss^*$), critère dont l'interprétation statistique est plus satisfaisante. La solution existe toujours puisque la densité de probabilité de ${}^*ss^*$ est bornée supérieurement.

De plus, dans l'espace Σ , l'espérance mathématique a toujours un sens et elle coïncide avec le mode, la médiane, le centre de symétrie. La solution proposée est donc la plus satisfaisante puisqu'elle cherche à s'approcher au maximum du point commun défini par l'une de ces quatre quantités.

Remarque. — Le point solution n'a aucune raison de coïncider avec un maximum de densité de probabilité dans l'espace des inconnues ou dans l'espace des observations où d'ailleurs il peut exister plusieurs maximums. Notre méthode évite donc les ambiguïtés qui pourraient exister dans ces espaces.

3. Hypothèse fondamentale. — HYPOTHÈSE 1 D'EXISTENCE. — Pour mettre en œuvre le critère dans l'espace du bruit, il faut qu'à partir d'un \mathbf{z}^* donné on puisse remonter aux valeurs génératrices \mathbf{s}^* du vecteur aléatoire σ^* , c'est-à-dire que l'opérateur :

$$\begin{bmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{bmatrix}^{-1}$$

existe, ce que nous avons supposé dans la conception de la chaîne de mesure.

Dans ce cas, après s'être proposé un \mathbf{z}^* , on calculera $\mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{z}^*)$ puis $\mathbf{y}^* - \mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{z}^*)$ d'une part, et $\mathbf{z}^* - \mathbf{h}^*$ d'autre part. De cet ensemble de $n_x + n_y$ valeurs, on remontera à \mathbf{s}^* :

$$\mathbf{s}^* = \begin{bmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{bmatrix}^{-1} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{z}^* - \mathbf{h}^* \\ \mathbf{y}^* - \mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{z}^*) \end{bmatrix} \right) \quad (22)$$

Cette condition a toujours pu être remplie dans toutes les utilisations que nous avons essayées. L'hypothèse H_1 nous permet donc de calculer :

$$\varepsilon(\mathbf{z}^*) = {}^*ss^* \quad (23)$$

La solution de notre problème est :

$$z_0 : \varepsilon(\mathbf{z}_0) \leq \varepsilon(\mathbf{z}^*) \quad \forall \mathbf{z}^* \quad (24)$$

Les trois formules (22), (23) et (24) encadrées constituent ce que nous appelons (au sens abstrait) l'algorithm optimal. On remarque qu'il ne nécessite pas l'inversion de \mathcal{A} (fig. 2), ce qui est en général impossible.

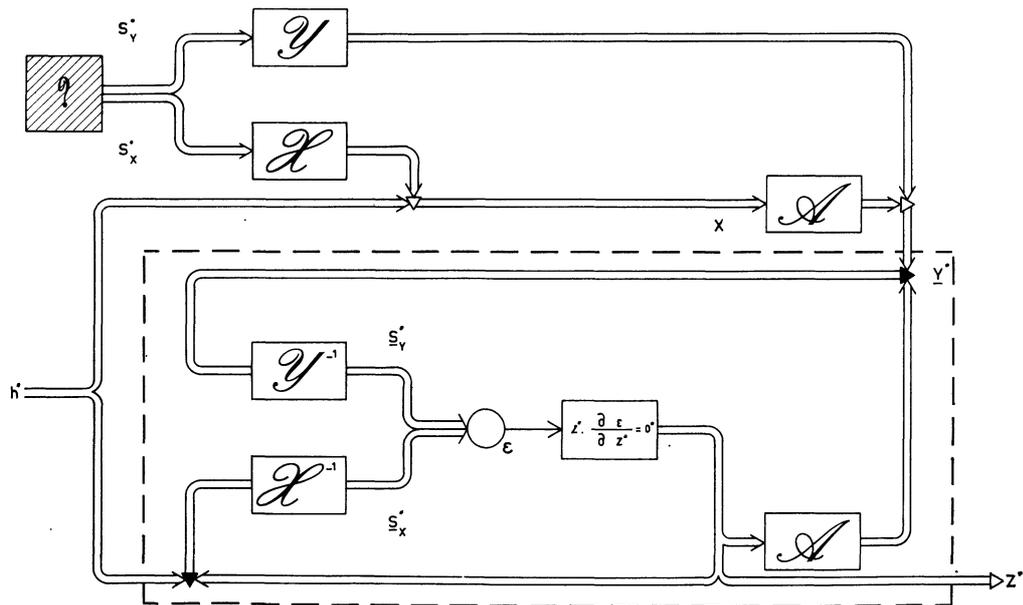


FIG. 2. — Schéma montrant l'écoulement des informations dans une chaîne de mesure complète (appareil et ordinateur).

La minimisation en \mathbf{z}^* correspond à l'optimisation numérique, la minimisation en \mathbf{p}^* correspondrait à l'optimisation instrumentale.

4. **Hypothèses auxiliaires.** — A. HYPOTHÈSE 2 DE CAUSALITÉ. — Nous supposons ensuite qu'il n'y a pas de corrélation entre $\mathcal{X}(\mathbf{s}^*)$ et $\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*)$: l'erreur sur la $j^{\text{ème}}$ observation est sans influence sur l'écart entre la valeur exacte x_k de la $k^{\text{ème}}$ inconnue et la valeur centrale h_k , hypothèse qui paraît assez naturelle si l'on admet que les x_i préexistent à la mesure.

Alors $\mathcal{X}(\mathbf{s}^*)$ s'écrit comme n_x fonctions de n_x composantes de \mathbf{s}^* (par exemple les n_x premières) et $\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*)$ s'écrit comme n_y fonctions des n_y autres composantes de \mathbf{s}^* (les n_y dernières). Ainsi :

$$\mathcal{X}(\mathbf{s}^*) = \mathcal{X}_{\square}(\mathbf{s}_x^*) \tag{25}$$

$$\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*) = \mathcal{Y}_{\square}(\mathbf{s}_y^*) \tag{26}$$

où \mathbf{s}_x^* désigne les n_x premières composantes de \mathbf{s}^* et \mathbf{s}_y^* désigne les n_y dernières composantes de \mathbf{s}^* .

L'expression $\mathbf{s}\mathbf{s}^*$ s'écrit alors :

$$\mathbf{s}\mathbf{s}^* = \mathbf{s}_x \mathbf{s}_x^* + \mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^* \tag{27}$$

soit :

$$\begin{aligned} \mathbf{s}\mathbf{s}^* &= \sum_{i=1}^{n_x} [\mathbf{u}_i \mathcal{X}_{\square}^{-1}(\mathbf{z}^* - \mathbf{h}^*)]^2 \\ &+ \sum_{j=1}^{n_y} [\mathbf{u}_j \mathcal{Y}_{\square}^{-1}(\mathbf{y}^* - \mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{z}^*))]^2 \end{aligned} \tag{28}$$

où \mathbf{u}_i désigne le vecteur ligne dont tous les éléments sont nuls, sauf le $i^{\text{ème}}$ qui est égal à l'unité.

Remarque. — Les opérateurs \mathcal{X} et \mathcal{Y} ne jouent de rôle direct que dans la conception de la chaîne de mesure. En fait, dans les calculs, seuls leurs inverses interviennent. Aussi en pratique on pose directement $\mathcal{X}_{\square}^{-1}$ et $\mathcal{Y}_{\square}^{-1}$, ce qui évite toute inversion de système d'équations non linéaires.

B. HYPOTHÈSE 3. — Nous supposons qu'on n'aura jamais affaire à un bruit $\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*)$ à la fois non laplacien et non blanc.

Le programme standard est prévu pour un bruit blanc laplacien, c'est-à-dire que \mathcal{Y}_{\square} est représenté par une matrice diagonale à coefficients indépendants de \mathbf{s}^* .

Si le bruit est laplacien mais non blanc, c'est que \mathcal{Y}_{\square} est représentable par une matrice \mathbf{Y} non diagonale à coefficients indépendants de \mathbf{s}^* . On peut alors trouver une matrice orthogonale \mathbf{T} telle que $\mathbf{T}\mathbf{Y}\mathbf{T}^{-1}$ soit une matrice diagonale. On prendra alors comme observations le vecteur $\mathbf{T}\mathbf{y}^*$, ce qui nous ramènera au cas standard.

Si le bruit est blanc mais non laplacien, c'est que le vecteur $\mathcal{Y}_{\square}(\mathbf{s}_y^*)$ est formé d'éléments ne dépendant chacun que d'une composante de \mathbf{s}_y^* . Il suffira alors de modifier la fonction de coût en conséquence. Par exemple, c'est le cas des comptages de quanta très peu nombreux. Ils suivent la loi de Poisson. La loi de

Laplace du programme standard accepterait des comptages de quanta négatifs. Cependant, en fait, cette probabilité est très faible. Elle devient pratiquement nulle dès que le nombre de quanta par comptage dépasse 180, en sorte qu'il n'est pas utile de faire de modification si l'on ne traite pas de comptages inférieurs à cette valeur.

C. HYPOTHÈSE 4. — Enfin, nous supposons également les incertitudes *a priori* sur les inconnues sans corrélations entre elles, hypothèse qui est assez restrictive mais très utile pour avoir des calculs rapides. On peut d'ailleurs arriver à atténuer cet inconvénient par un choix convenable des inconnues, c'est-à-dire de l'équation du phénomène.

Exemples :

a) On désire évaluer les paramètres a et c de la maille d'un cristal appartenant au système quadratique. En général, on possède une bonne information préalable sur la valeur du rapport c/a . On peut exploiter cette information en choisissant comme inconnues a et c/a .

b) Un multiplet est constitué de raies placées dans un ordre déterminé, c'est-à-dire que l'abscisse de la deuxième est supérieure à l'abscisse de la première, etc. Soient ξ_2, ξ_5, ξ_8 , etc., ces abscisses. On prendra comme inconnues $x_2 = \xi_2, x_5 = \xi_5 - \xi_2, x_8 = \xi_8 - \xi_5$, etc.

Une loi de Laplace-Gauss ne serait plus ici satisfaisante. En effet, la densité de probabilité n'est plus forcément symétrique autour de la valeur centrale. D'autre part, il y a presque toujours des limites absolues aux valeurs des inconnues, c'est-à-dire un support borné allant de x^i à x^s , la valeur centrale x^c n'étant pas en général au milieu de ce support.

On a ainsi trois points par lesquels doit passer la fonction de répartition : $(x^i, 0), (x^c, 1/2), (x^s, 1)$. Pour des raisons de simplicité, le mode de raccordement a été piloté par un seul paramètre Δx dans le programme standard. Par analogie avec la méthode de l'opérateur optimal, la fonction de répartition coïncide avec la loi de Laplace-Gauss et le paramètre Δx coïncide avec l'écart type de cette loi, lorsque les bornes sont rejetées à l'infini. Lorsque $x_s - x_i$ est borné, la densité de probabilité de $s(x)$ présente la même courbure au sommet que la loi normale qui a Δx pour écart type. On répond ainsi au point 2 d du choix du critère de qualité.

Pour chaque variable, on aura, entre la densité de probabilité de la variable inconnue et la densité de probabilité de la variable aléatoire normale réduite qui l'engendre, la relation :

$$p(\xi) d\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\xi^2/2} d\xi \tag{29}$$

et entre leurs lois de répartition :

$$\int_{-\infty}^x p(\xi) d\xi = F(x) = \text{Erf}(s). \tag{30}$$

On voit tout de suite que $s = 0$ correspond à la médiane puisque $\text{Erf}(0) = 1/2$ et qu'alors :

$$\int_{-\infty}^{x_c} p(\xi) d\xi = \frac{1}{2}. \quad (31)$$

Ces formules permettent d'expliciter la composante de \mathcal{X}_{\square} relative à l'inconnue actuellement considérée :

$$z = F^{-1}(\text{Erf}(s)) \quad (32)$$

ou d'expliciter la relation qui correspond à $\mathcal{X}_{\square}^{-1}$ et donne s en fonction de z :

$$s = \text{Erf}^{-1} \left(\int_{-\infty}^z (p(\xi) d\xi) \right). \quad (33)$$

Pour l'ensemble des inconnues, on aura :

$$p(\mathbf{x}^*) = p_1(x_1) p_2(x_2), \dots, p_n(x_n) \quad (34)$$

$$p(\mathbf{s}_x^*) = [2\pi]^{-n_x/2} e^{-\frac{1}{2} \cdot \mathbf{s}_x \cdot \mathbf{s}_x^*}. \quad (35)$$

5. Fonction choisie. — Une densité de probabilité très simple répondant aux points précédents résulte de l'application suivante :

$$\begin{aligned} s &= -\infty && \text{si } z < x_i \\ s &= \frac{z - x_c}{\Delta x} \sqrt{\frac{[x_c - x_i][x_s - x_c]}{[z - x_i][x_s - z]}} && \text{si } x_i \leq z < x_s \\ s &= \infty && \text{si } x_s < z \end{aligned} \quad (36)$$

où x_i correspond à la borne inférieure,
 x_c correspond à la valeur centrale h ,
 x_s correspond à la borne supérieure,
 Δx correspond à l'incertitude *a priori* sur x .

Cette loi de répartition n'autorise que des limites portant indépendamment sur chaque inconnue. Par conséquent, le domaine permis forme un paralléloétope. Il est possible de construire des lois à limites ellipsoïdales d'orientation quelconque, mais elles nécessitent beaucoup de calculs et alourdissent l'entrée des données.

Finalement, la fonction de coût à minimiser :

$$\varepsilon = -2 \text{Log } p = \cdot \mathbf{ss}^* = \cdot \mathbf{s}_x \mathbf{s}_x^* + \cdot \mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^* \quad (37)$$

peut s'écrire :

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^n \left[\frac{z_i - x_i^c}{\Delta x_i} \right]^2 \frac{x_i^s - x_i^c}{x_i^s - z} \frac{x_i^c - x_i^i}{z - x_i^i} + \sum_{j=1}^N \left[\frac{y_j - \cdot \mathbf{u}_j \mathcal{A}(\mathbf{z}^*)}{\Delta y_j} \right]^2. \quad (38)$$

6. Contraintes et liaisons. — A. LIAISONS. — Nous appelons liaisons les contraintes définies par des égalités. Il ne peut y en avoir qu'un nombre inférieur à n_x , le nombre des inconnues.

On traduira les liaisons en choisissant un système d'inconnues tel qu'une inconnue est constante sur chaque liaison. Le Δx lié à cette inconnue sera pris nul. Le programme ne prend pas en compte cette inconnue dans le calcul de ε et impose $z_i = x_i^c$. Chaque liaison est ainsi satisfaite.

B. CONTRAINTES. — Nous appelons contraintes les relations définies par des inégalités auxquelles doivent répondre les évaluations. Ce sont :

$$z_i \leq x_i^s \quad \text{et} \quad z_i \geq x_i^i.$$

Elles définissent un domaine permis Π inclus dans Ξ .

Lorsque l'une ou l'autre de ces relations n'est pas vérifiée, la probabilité du système est nulle. Autrement dit, ε est infini. On ne peut représenter exactement cette situation en ordinateur. Mais on peut remplacer l'infini par un nombre très grand G , ce qui revient à admettre une densité de probabilité $e^{-G/2}$ non nulle, mais négligeable en dehors du domaine permis. Toutefois, si G était indépendant de la distance à la limite violée, la densité de probabilité ne serait pas normalisable à l'unité. Pour la rendre normalisable, on majore G d'autant plus qu'on s'éloigne de la limite violée en dehors du domaine permis, ce qui a l'avantage de rendre le coût sensible à cette distance. Pour cela, on définit une fonction $q(\mathbf{z}^*)$ telle que :

$$q(\mathbf{x}_c^*) \geq \varepsilon(\mathbf{x}_c^*). \quad (39)$$

Cette fonction sera par exemple :

$$q(\mathbf{z}^*) = \sum_i \frac{z_i - x_i^c}{x_i^i - x_i^c} \quad (40)$$

où x_i^i désigne x_i^s ou x_i^i suivant qu'on est du côté de la limite supérieure ou de la limite inférieure.

La fonction de coût s'écrit alors :

$$\varepsilon' = \begin{cases} \cdot \mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^* + \text{Min} \{ \cdot \mathbf{s}_x \mathbf{s}_x^*, \lambda q(\mathbf{z}^*) \} & \text{si } \mathbf{z}^* \in \Pi \\ \cdot \mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^* + \lambda q(\mathbf{z}^*) & \text{si } \mathbf{z}^* \notin \Pi. \end{cases} \quad (41)$$

Il est intuitif (et ce résultat peut s'établir avec rigueur) que pour un λ suffisamment grand, le minimum de ε' satisfait exactement les contraintes.

7. Valeur de la fonction de coût au minimum. —

La fonction de coût ε dépend de $n_x + n_y$ variables aléatoires normales réduites, liées par n_x relations. Or nous savons qu'au minimum ε_0 de ε ces variables doivent suivre, si les incertitudes ont été bien estimées, une loi du χ^2 à n_y degrés de liberté. Par conséquent, toujours dans l'hypothèse où les erreurs ont été bien estimées, l'espérance mathématique de ε_0 est égale à n_y .

En fait, dans certains des cas, il arrive que le coefficient ε_0/n_y soit différent de 1. Les explications sont à rechercher dans l'inexactitude d'un ou plusieurs des trois opérateurs pilotant la description de la chaîne de mesure :

A. ERREUR SUR \mathcal{X} OU \mathbf{x}_c^* . — On peut avoir fourni des valeurs x_i, x_c, x_s ou Δx inexactes, ce qui déplace la solution de l'algorithme vers une situation peu probable. On localise la ou les variables responsables parce que les solutions fournies se trouvent placées près des limites x_i ou x_s , ou bien parce que l'écart statistique final est à peine inférieur à Δx .

B. ERREUR SUR \mathcal{A} . — Le phénomène physique réel ne suit peut-être pas la loi supposée. Si les observations

suivent l'hypothèse H_5 exposée plus loin, l'estimateur de qualité (III.2) fournit la confirmation de ce fait.

C. ERREUR SUR \mathcal{Y} . — Les erreurs expérimentales sont peut-être plus grandes qu'on ne le supposait. Cela se produit lorsqu'il existe quelques données erratiques. On les remarque en général facilement parce que leurs valeurs calculées diffèrent de leur valeur observée de plusieurs fois leur écart type.

Il peut arriver aussi que l'échelle des erreurs statistiques des observations ait été mal évaluée. On trouvera dans les paramètres de qualité une évaluation correcte de cette échelle (III.3).

8. Mode de minimisation de la fonction de coût. — La méthode employée pour minimiser la fonction de coût est sans influence sur la solution trouvée (à moins d'être inefficace).

On pourra donc utiliser une méthode de gradient à pas constant, ou variable. On pourra essayer des méthodes euristiques de tirage au hasard. On pourra aussi employer la méthode de Nelder et Mead (1965) [18] qui utilisent un simplexe et une stratégie affine. Cet algorithme (entièrement différent de la « méthode du simplexe » de Dantzig (1949) [6] nous a donné complètement satisfaction dans la version rédigée par F. Bibian (1965) [16].

On fournit au sous-programme (ou le sous-programme le construit s'il n'est pas fourni) un simplexe dans l'espace Ξ . D'après les valeurs de $\varepsilon(\mathbf{z}^*)$ en chacun des $n_x + 1$ sommets, on déplace le sommet le plus élevé du simplexe selon une stratégie affine définie par trois coefficients. De proche en proche, le simplexe se déplace pour se concentrer finalement autour du point \mathbf{z}_0 minimal. On sort du sous-programme soit sur un test de temps, soit sur un test de précision, dispersion des hauteurs de sommets inférieure à une valeur donnée.

9. Extension en cas d'abscisses incertaines. — A. HYPOTHÈSE 5. — Il arrive que les composantes de l'opérateur \mathcal{A} résultent de l'échantillonnage d'une fonction $a(t, \mathbf{x}^*)$ dépendant continûment d'un paramètre t continu (abscisse), ce paramètre variant seul d'une observation à l'autre. On aura alors :

$$\mathbf{u}_j \mathcal{A}(\mathbf{x}^*) = a(t_j, \mathbf{x}^*). \quad (42)$$

Exemple : Soient deux raies spectrales d'intensités, positions et largeurs variables enregistrées superposées à un fond continu linéaire. L'équation du flux attendu en fonction des abscisses s'écrit au point j d'abscisse t_j :

$$\tilde{y}_j = x_1 + x_2 t_j + x_3 f_1 \left(\frac{t_j - x_4}{x_5} \right) + x_6 f_2 \left(\frac{t_j - x_7}{x_8} \right) \quad (43)$$

où f_1 et f_2 sont les formes réduites des deux raies. Le paramètre continu est t . Il vaut t_1 pour \tilde{y}_1 , t_2 pour \tilde{y}_2 , etc.

B. HYPOTHÈSE 6. — Supposons de plus que les abscisses soient entachées d'incertitude. En toute rigueur, le problème devrait alors être formulé différemment en considérant les abscisses vraies comme des inconnues, et les abscisses observées comme des observations. Le nombre des inconnues en serait grandement accru, ce qui est un inconvénient.

Toutefois, si la valeur centrale conditionnelle de chaque observation varie peu dans le domaine d'incertitude de l'abscisse, il est possible de garder le formalisme général en altérant seulement les poids des observations.

Soit $\eta_j = y_j - \mathbf{u}_j \mathcal{A}(t_j; \mathbf{z}^*)$ l'écart entre la valeur calculée et observée de la $j^{\text{ème}}$ observation et σ_y l'incertitude sur cette observation. La contribution au coût serait pour des abscisses certaines η_j^2 / σ_y^2 .

Soit :

$$r_j \triangleq \frac{\partial}{\partial t_j} \mathbf{u}_j \mathcal{A}(t_j; \mathbf{z}^*) \quad (44)$$

la pente de la valeur centrale conditionnelle en fonction des abscisses. Dans ce cas, au lieu d'admettre que la valeur calculée est au point Q (fig. 3) de même abscisse

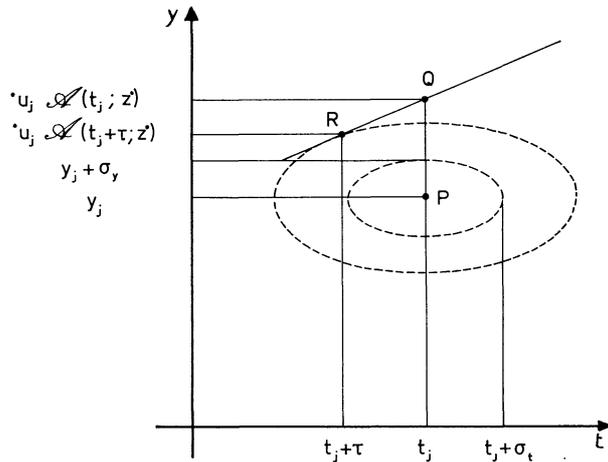


FIG. 3.

Correction approchée des incertitudes d'abscisse.

que le point P observé, il faut admettre que le point calculé se trouve ailleurs. Soit R ce point. Sa position la plus probable se trouve là où la courbe représentative $\mathbf{u}_j \mathcal{A}(t_j; \mathbf{z}^*)$ en fonction de t_j est tangente à l'ellipse centrée sur P homothétique de l'ellipse indicatrice de demi-axes σ_t et σ_y .

Cette situation contribue au coût ε par la densité de probabilité au point qui correspond dans l'espace Σ au point R dans le plan $\eta_j \otimes t$, d'où l'on déduit que :

$$-2 \text{Log } p_j = \frac{\eta_j^2}{\sigma_y^2 + r^2 \sigma_t^2} \quad (45)$$

où σ_t est l'incertitude sur l'abscisse du point P.

V. PARAMÈTRES DE QUALITÉ

Les évaluations des inconnues ont été obtenues comme étant les valeurs qui maximisent la probabilité du générateur laplacien, c'est-à-dire qui minimisent la fonction de coût. Il est intéressant de savoir quelle est l'erreur probable sur les évaluations et de calculer les éventuelles corrélations entre ces évaluations, d'autre part de définir et d'estimer des coefficients de qualité, permettant de juger de façon objective de la validité de la description du phénomène physique.

1. **Expressions de la matrice de covariance.** — Pour évaluer l'erreur probable sur les évaluations, nous allons calculer la matrice \mathbf{E} de covariance de ces évaluations. Par définition :

$$\mathbf{E} \triangleq \int_{\Sigma} [\mathbf{z}^* \cdot \mathbf{z}] p(\mathbf{s}^*) dv(\mathbf{s}^*) - \left[\int_{\Sigma} \mathbf{z}^* p(\mathbf{s}^*) dv(\mathbf{s}^*) \right] \left[\int_{\Sigma} \mathbf{z} p(\mathbf{s}^*) dv(\mathbf{s}^*) \right]. \quad (46)$$

Dans le cas linéaire, cette matrice est telle que :

$$\varepsilon(\mathbf{z}^*) = \varepsilon(\mathbf{z}_0^*) + [\mathbf{z}^* - \mathbf{z}_0^*] \mathbf{E}^{-1} [\mathbf{z}^* - \mathbf{z}_0^*]. \quad (47)$$

On sait (Tournarie, 1964 b [13]) que dans le cas linéaire cette matrice se présente sous diverses expressions équivalentes dont l'une des plus pratiques est :

$$\mathbf{E} = [\mathbf{I} + \mathbf{X}\tilde{\mathbf{X}}\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{W}\mathbf{A}]^{-1} \mathbf{X}\tilde{\mathbf{X}} \quad (48)$$

avec \mathbf{I} : matrice unité,

$\mathbf{X}\tilde{\mathbf{X}}$: matrice de covariance *a priori* des inconnues,

\mathbf{W} : matrice des poids des observations,

\mathbf{A} : matrice de l'application linéaire donnant les médianes des observations en fonction des inconnues.

Lorsqu'on veut calculer \mathbf{E} dans le cas non linéaire, les trois expressions précédentes ne coïncident plus exactement. Notre choix est surtout guidé par des considérations pratiques.

La formule de définition est inexploitable car elle comprend des intégrales multiples (de multiplicité n_x). Le calcul de ces intégrales devrait être fait soit analytiquement, soit numériquement. Or, analytiquement, ces intégrales ne peuvent pas être intégrées dans tous les cas. On ne peut en effet les intégrer que pour les systèmes linéaires ou dans des cas trop simples pour présenter un intérêt pratique. Quant au calcul numérique, du fait de la haute multiplicité des intégrales, il requiert des temps prohibitifs.

La deuxième formule permet dans les cas linéaires de déterminer des évaluations qui abaissent la probabilité du système d'un facteur \sqrt{e} . Les incertitudes sur chaque évaluation sont données par les valeurs extrêmes prises successivement par chacune des composantes de \mathbf{z}^* dans l'équation :

$$[\mathbf{z}^* - \mathbf{z}_0^*] \mathbf{E}^{-1} [\mathbf{z}^* - \mathbf{z}_0^*] = 1 \quad (49)$$

(hyper-ellipsoïde indicateur).

Dans les systèmes non linéaires, l'équation correspondante est :

$$\varepsilon(\mathbf{z}^*) = \frac{n_y + 1}{n_y} \varepsilon_0. \quad (50)$$

Malheureusement, cette équation implicite est difficile à résoudre. Sa résolution d'ailleurs ne nous renseignerait pas sur les corrélations entre les évaluations à moins de faire une étude très détaillée de l'hyper-surface qu'elle définit dans l'espace Ξ .

La troisième formule a l'avantage d'être explicite et de ne demander que le calcul des dérivées aux points correspondants aux évaluations obtenues.

Nous ferons la conjecture que ces trois expressions conduisent à des matrices peu différentes. Nous choisirons alors la troisième pour des raisons de simplicité et de rapidité de calcul.

A. STRUCTURE DE L'ERREUR. — Bien qu'ayant exactement les mêmes propriétés, notre matrice de covariance \mathbf{E} n'a pas la même signification que la matrice de covariance $[\mathbf{A}\mathbf{W}\mathbf{A}]^{-1}$ de la méthode des moindres carrés.

En effet, du fait de l'influence des informations préalables, la solution moyenne $\tilde{\mathbf{z}}_0^*$ possède un biais par rapport à la valeur exacte. En d'autres termes : supposons que l'on recommence un grand nombre de fois la même série d'observations y_j et qu'on effectue l'exploitation de chaque série en partant toujours des mêmes valeurs supposées \mathbf{x}_c^* (\mathbf{x}^* étant le même dans toutes les séries). Alors la moyenne $\tilde{\mathbf{z}}_0^*$ des valeurs trouvées \mathbf{z}_0^* sera différente de \mathbf{x}^* .

Cette propriété n'est pas une objection à notre méthode en raison des deux points suivants, chacun étant suffisant pour rejeter l'objection :

1. Lorsqu'on recommence une série d'observations, les informations préalables utilisées pour l'exploitation numérique d'une série doivent être les résultats obtenus par l'exploitation numérique de la série précédente. De la sorte le biais s'atténue : *l'algorithme optimal est asymptotiquement non biaisé*.

2. Connaissant par \mathcal{X} la dispersion des inconnues \mathbf{x}^* autour des valeurs *a priori* \mathbf{x}_c^* , on peut calculer la valeur quadratique moyenne du biais et la prendre en compte dans l'erreur. C'est ce que fait la formule donnant \mathbf{E} . On constate alors l'importante propriété suivante :

— *L'erreur totale (biais et fluctuation) de la méthode optimale est toujours plus petite que l'erreur de la méthode des moindres carrés* (Tournarie, 1964 a [12]). En effet, autour du point minimal, la matrice \mathbf{E}^{-1} est définie positive. Ses éléments sont :

$$\{\mathbf{E}^{-1}\}_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} \varepsilon \quad i, j \in [1, n_x]. \quad (51)$$

Si l'on utilisait la méthode des moindres carrés, on minimiserait $\mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^*$. La matrice de covariance (définie positive) sera alors donnée par :

$$\{\Phi_0^{-1}\}_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} \mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^* \quad i, j \in [1, n_x]. \quad (52)$$

On a donc pour un vecteur \mathbf{v}^* quelconque :

$$\mathbf{v}^* \mathbf{E}^{-1} \mathbf{v}^* > \mathbf{v}^* \Phi_0^{-1} \mathbf{v}^* \quad (53)$$

ce qui entraîne que :

$$\mathbf{v}^* \Phi_0 \mathbf{v}^* > \mathbf{v}^* \mathbf{E} \mathbf{v}^* \quad \text{C.Q.F.D.} \quad (53')$$

B. ÉVALUATION DE LA MATRICE \mathbf{A} . — Nous allons développer l'opérateur \mathcal{A} en série de Taylor autour du point minimal \mathbf{z}^* de ε et n'en retenir que la partie linéaire. On a formellement, en négligeant les termes de degré supérieur ou égal à deux :

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}^*) - \mathcal{A}(\mathbf{z}^*) = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial \boldsymbol{\xi}}(\mathbf{z}^*) [\boldsymbol{\xi}^* - \mathbf{z}^*]. \quad (54)$$

Il nous est donc nécessaire de connaître les n_x dérivées partielles de la loi théorique \mathcal{A} par rapport aux variables $\boldsymbol{\xi}^*$ dans l'espace des inconnues pour chacun des n_y points expérimentaux, c'est-à-dire les $n_x n_y$ valeurs de :

$$A_{ji} = \frac{\partial a_j}{\partial \xi_i}(\mathbf{z}^*) \quad \begin{matrix} i \in [1, n_x] \\ j \in [1, n_y] \end{matrix} \quad (55)$$

où $a_j(\boldsymbol{\xi}^*)$ est la $j^{\text{ième}}$ composante de $\mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}^*)$:

$$a_j(\boldsymbol{\xi}^*) = \mathbf{u}_j \mathcal{A}(\boldsymbol{\xi}^*) \quad j \in [1, n_y]. \quad (56)$$

Il semble ainsi que nous nous heurtions de nouveau au problème du calcul des dérivées de la loi théorique, problème que nous avons soigneusement évité lors de la minimisation de la fonction de coût ε .

En fait, les conditions sont maintenant totalement différentes : en effet, nous nous trouvons au minimum de la fonction de coût ε et il est facile de voir qu'au voisinage de ce minimum, si les informations expérimentales forment la partie la plus importante de l'information totale, la fonction ε est assimilable à un hyper-paraboloïde.

Si les informations expérimentales sont petites en comparaison des informations *a priori*, et si \mathcal{X} est très peu linéaire, le calcul risque d'être faux, mais de toute façon il n'a plus d'intérêt puisque l'on sait que dans ce cas on retrouvera uniquement les informations *a priori*.

Cette propriété de courbure va nous permettre de choisir un pas optimal pour l'évaluation des dérivées : nous allons chercher pour chacune des composantes du vecteur des évaluations \mathbf{z}^* , un pas dz_i correspondant à une perte de probabilité donnée dans l'espace Σ du bruit, c'est-à-dire à une augmentation donnée de ε .

Pour coïncider avec le système linéaire, nous chercherons l'accroissement dz_i tel que la fonction de coût ε soit augmentée de la même quantité dont elle serait augmentée dans un système linéaire si l'on se portait sur l'hyper-ellipsoïde indicateur. Nous cherchons donc dz_i tel que :

$$\varepsilon(\mathbf{z}^* + \mathbf{u}_i^* dz_i) \quad \text{si} \quad \varepsilon(\mathbf{z}^*) = n_y \quad (57)$$

ou :

$$\varepsilon(\mathbf{z}^* + \mathbf{u}_i^* dz_i) = [n_y + 1] \frac{\varepsilon_0}{n_y} \quad \text{si} \quad \varepsilon(\mathbf{z}^*) = \varepsilon_0 \neq n_y. \quad (57')$$

Pour trouver rapidement les pas dz_i sur chacune des inconnues, nous pouvons utiliser le fait que $\varepsilon(\mathbf{z}^*)$ doit être, aux environs du minimum, assimilable à un hyper-paraboloïde. Une itération par interpolations paraboliques donnera rapidement la valeur cherchée. D'autre part, la valeur $[1 + (1/n_y)] \varepsilon_0$ n'étant pas critique, nous chercherons en pratique (pour des raisons d'économie de temps) l'accroissement dz_i tel que :

$$dz_i : \frac{[1 + n_y]}{n_y \sqrt{2}} \varepsilon(\mathbf{z}^*) < \varepsilon(\mathbf{z}^* + \mathbf{u}_i^* dz_i) < \frac{[1 + n_y] \sqrt{2}}{n_y} \varepsilon(\mathbf{z}^*) \quad (58)$$

pour $i \in [1, n_x]$.

Nous sommes maintenant en mesure d'évaluer les coefficients de la matrice \mathbf{A} par l'expression :

$$A_{ji} = \frac{a_j(\mathbf{z}^* + \mathbf{u}_i^* dz_i) - a_j(\mathbf{z}^*)}{dz_i} \quad \begin{matrix} i \in [1, n_x] \\ j \in [1, n_y] \end{matrix} \quad (59)$$

C. ESTIMATION DE LA MATRICE \mathbf{W} . — Si le bruit perturbant les observations est laplacien, l'opérateur \mathcal{Y} est linéaire, donc indépendant de \mathbf{s}^* et de \mathbf{z}^* . Nous disposons donc de sa valeur qui a été donnée *a priori*.

Si le bruit perturbant les observations n'est pas laplacien, il est blanc d'après l'hypothèse H_3 . \mathbf{W} est diagonale mais peut dépendre de \mathbf{s}^* . On peut alors calculer directement \mathbf{W} :

$$W_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \mathbf{s}_y \mathbf{s}_y^* = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} |\mathcal{Y}_0^{-1}(\mathbf{y}^* - \mathcal{A}(\mathbf{z}^*))|^2. \quad (60)$$

Enfin, si le bruit perturbant les observations est à la fois blanc et laplacien, \mathcal{Y}_0 est diagonal et linéaire. \mathbf{W} est une matrice diagonale dont les coefficients se déduisent des incertitudes Δy sur les observations :

$$W_{jj} = \frac{1}{\Delta y_j^2}.$$

D. ESTIMATION DE LA MATRICE \mathbf{X} . — Si le vecteur aléatoire $\boldsymbol{\xi}^*$ est laplacien, l'opérateur \mathcal{X}_{\square} est linéaire. Sa représentation est une matrice \mathbf{X} indépendante de \mathbf{s}^* et de \mathbf{z}^* . Nous disposons donc de sa valeur qui était connue *a priori* : $\mathbf{X}\tilde{\mathbf{X}}$ est en effet la matrice initiale d'intercorrélation des inconnues.

Si le vecteur aléatoire $\boldsymbol{\xi}^*$ dont les inconnues sont un tirage n'est pas laplacien, l'opérateur \mathcal{X}_{\square} n'est pas linéaire : nous obtiendrons la matrice cherchée en dérivant $\mathbf{s}_x \mathbf{s}_x^*$:

$$\{[\mathbf{X}\tilde{\mathbf{X}}]^{-1}\}_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} \mathbf{s}_x \mathbf{s}_x^*. \quad (62)$$

Dans la réalisation standard du programme optimal, nous avons admis l'hypothèse H_4 qui conduit à un opérateur \mathcal{X}_{\square} diagonal non linéaire. On peut expliciter les valeurs de la matrice d'intercorrélation autour du point z_0^* solution :

$$\{[\mathbf{X}\tilde{\mathbf{X}}]^{-1}\}_{ii} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \mathbf{s}_x \mathbf{s}_x^*. \quad (63)$$

On trouve alors pour la fonction choisie :

$$\{\mathbf{XX}\}_{ii}^{-1} = \frac{1}{\Delta x_i^2} \frac{[x_i^s - x_i^c][x_i^c - x_i^i]}{[x_i^s - z_i][z_i - x_i^i]}$$

$$\left[1 + \frac{[z_i - x_i^c]^2}{[z_i - x_i^i]^2} - \frac{[z_i - x_i^c]}{[z_i - x_i^i]} \frac{[z_i - x_i^c]}{[x_i^s - z_i]} + \frac{[z_i - x_i^c]^2}{[x_i^s - z_i]^2} \right]$$
(64)

qui est toujours positif.

E. CALCUL DE \mathbf{E} ET DES QUANTITÉS QUI EN DÉCOULENT. — L'inversion de la matrice $\mathbf{I} + \mathbf{XX}\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{WA}$ ne présente pas de difficultés car elle est toujours définie positive. Un sous-programme classique utilisant le principe du pivot maximal donnera facilement $[\mathbf{I} + \mathbf{XX}\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{WA}]^{-1}$, d'où l'on tirera \mathbf{E} .

L'écart statistique autour de la $i^{\text{ième}}$ inconnue est alors égal à :

$$\sigma_i = \sqrt{E_{ii}} \quad (65)$$

tandis que le coefficient de corrélation entre la $i^{\text{ième}}$ et la $h^{\text{ième}}$ inconnue est égal à :

$$\rho_{hi} = \frac{E_{hi}}{\sqrt{E_{hh}E_{ii}}} \quad (66)$$

2. **Estimateur de qualité.** — Lorsque l'hypothèse H_5 est réalisée (observations sur des abscisses), il est possible d'estimer la qualité des équations \mathcal{A} descriptives du phénomène.

Nous supposons toujours que les erreurs statistiques sur les observations sont sans corrélations entre elles. Donc si nous observons des corrélations liant les écarts ε_j entre les observations y_j et leurs valeurs calculées $y_j = \mathbf{u}_j \mathcal{A}(\mathbf{z}^*)$ d'après les évaluations fournies par l'algorithme optimal, ces corrélations doivent être attribuées à l'impossibilité pour l'équation utilisée de décrire convenablement la valeur centrale vraie des observations.

L'écart ε_j peut alors être considéré comme la somme de deux termes :

$$\varepsilon_j = \delta_j + \varphi_j \quad (67)$$

si l'hypothèse H_2 est vraie (pas de corrélation entre la fluctuation sur la $j^{\text{ième}}$ observation et la valeur exacte de la $i^{\text{ième}}$ inconnue).

δ_j est la contribution de la distorsion due au fait que la loi théorique ne représente pas parfaitement le phénomène réel.

φ_j est la contribution de la fluctuation due au fait que les observations sont entachées d'incertitude.

Par définition, la fluctuation quadratique relative moyenne est égale à :

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\varphi_j^2}{\sigma_j^2} \quad (68)$$

la distorsion quadratique relative moyenne :

$$\bar{\delta} = \frac{1}{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\delta_j^2}{\sigma_j^2} \quad (69)$$

et l'erreur quadratique relative moyenne :

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_j^2}{\sigma_j^2} \quad (70)$$

Entre ces trois quantités, on aura, toujours dans le cas H_2 où il n'y a pas de corrélations entre δ_j et φ_j :

$$\bar{\varepsilon} = \bar{\varphi} + \bar{\delta} \quad (71)$$

D'autre part :

$$\varepsilon_j \varepsilon_k = \delta_j \delta_k + \delta_j \varphi_k + \delta_k \varphi_j + \varphi_j \varphi_k \quad (72)$$

Comme :

$$\tilde{\varphi}_k = 0 \quad (73)$$

$$\tilde{\varphi}_j = 0 \quad (74)$$

$$\tilde{\varphi}_j \varphi_k = 0 \quad (75)$$

on a :

$$\tilde{\varepsilon}_j \varepsilon_k = \tilde{\delta}_j \delta_k \quad \text{et} \quad \sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j+1}}{\sigma_j \sigma_{j+1}} = \sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\tilde{\delta}_j \delta_{j+1}}{\sigma_j \sigma_{j+1}} \quad (76)$$

HYPOTHÈSE H_7 . — Si les points sont assez serrés, on peut admettre que l'erreur systématique et la valeur quadratique moyenne de l'erreur statistique évoluent peu d'un point au suivant, soit :

$$\sigma_{j+1} \cong \sigma_j \quad (77)$$

$$\tilde{\delta}_j \delta_{j+1} \cong \tilde{\delta}_j^2 \quad (78)$$

d'où :

$$\frac{1}{n_y-1} \sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j+1}}{\sigma_j \sigma_{j+1}} \cong \frac{1}{n_y-1} \sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\tilde{\delta}_j^2}{\sigma_j^2} \cong \bar{\delta} \geq 0 \quad (79)$$

Nous avons ainsi un procédé pratique pour estimer $\bar{\delta}$. Nous pouvons ainsi définir une quantité expérimentale ρ qui sera voisine du rapport théorique $\bar{\delta}/\bar{\varepsilon}$:

$$\rho = \frac{\sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_j \varepsilon_{j+1}}{\sigma_j \sigma_{j+1}}}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_j^2}{\sigma_j^2} \sum_{j=1}^{n_y-1} \frac{\varepsilon_{j+1}^2}{\sigma_{j+1}^2}}} \cong \frac{\bar{\delta}}{\bar{\varepsilon}} \quad (80)$$

Comme $\bar{\varphi} \cong [1 - \rho] \bar{\varepsilon}$, nous voyons que la quantité $f = 1 - \rho$, toujours comprise entre 0 et 1, représente la contribution relative de la fluctuation quadratique relative moyenne à l'erreur quadratique relative moyenne.

Plus f est proche de 1, plus les écarts observés entre y_j et \underline{y}_j sont indépendants en moyenne, et meilleure est la qualité de la description du phénomène physique fournie par l'équation proposée.

Si au contraire f est proche de 0, cela signifie que la part de la distorsion $\bar{\delta}$ dans l'erreur $\bar{\varepsilon}$ devient prépondérante, ce qui veut dire que les \underline{y}_j décrivent systématiquement mal les y_j . Il y a donc à craindre que les évaluations des inconnues soient biaisées.

3. **Échelle des erreurs.** — Nous sommes également en mesure d'évaluer le rapport k , défini comme le quotient de l'erreur statistique moyenne réelle de

chaque observation par l'erreur statistique moyenne supposée *a priori*, dans l'hypothèse où elles ont toutes été affectées de la même inexactitude d'échelle.

En effet, nous connaissons la contribution f de la fluctuation à l'erreur totale. Comme nous connaissons également une évaluation de l'erreur quadratique moyenne réelle $\bar{\varepsilon}$, nous pouvons calculer :

$$\bar{\varphi} = f\bar{\varepsilon} = \frac{f}{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_j^2}{\sigma_j^2}. \quad (81)$$

Si les incertitudes expérimentales avaient été bien estimées, l'espérance mathématique de cette quantité aurait été égale à 1. Si l'on s'est trompé sur l'échelle des incertitudes et que les véritables incertitudes soient $k\sigma_j$ et non σ_j , c'est seulement l'expression :

$$\frac{f}{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_j^2}{k^2 \sigma_j^2}$$

qui vaudra 1 puisque f ne sera pas affecté par cette erreur d'échelle, comme on le voit facilement d'après sa définition.

On a donc :

$$k = \sqrt{\frac{f}{n_y} \sum_{j=1}^{n_y} \frac{\varepsilon_j^2}{\sigma_j^2}}. \quad (82)$$

Comme nous l'avons déjà fait remarquer, ce calcul n'est valable que lorsque k est assez voisin de 1. Sinon, il ne peut fournir qu'une indication sur le sens de l'erreur d'échelle commise dans l'estimation des incertitudes.

VI. ÉPILOGUE

1. Applications. — Depuis sa création jusqu'à sa publication sous sa forme générale actuelle, l'algorithme que nous venons de présenter a donné lieu à de nombreuses et fructueuses applications. Leur description détaillée n'a pas la place dans cet exposé de principe, mais certaines feront l'objet de la seconde partie de cet article.

Tous les types d'études qui se sont présentés en physique et en cristallographie ont pu entrer dans le cadre de cet algorithme. De plus, les critères de qualité ont mis parfois en évidence des défauts cachés dans les appareils ou dans la formulation des phénomènes physiques.

Citons :

A. SYSTÈMES LINÉAIRES STATIONNAIRES. — Lissage optimisé (1964 c) [14]. Correction de l'élargissement instrumental (1958 a) [8]. Filtre pour fréquencesmètre électronique (1959) [10]. Interpolation (1959) [10] et (1966 a) [20]. Dérivée de courbes expérimentales (SPSRM 322), non publié. Atténuation des effets de fin de série de Fourier (1958 a [8], 1966 a [20]).

B. SYSTÈMES LINÉAIRES NON STATIONNAIRES. — Répartition des tailles de cristallites (1964 a [12], 1966 c [21]) à partir des profils de raies de diffraction.

Paramètres réticulaires (systèmes cubique, quadratique, hexagonal, orthorhombique), appliqués à des mesures effectuées au moyen d'un goniomètre X à axe horizontal, l'algorithme optimal a mis en évidence un jeu de 0,008 °θ dans l'appareil.

Coefficients d'ordre magnétique à courte distance (Programme SPSRM 375 A).

Coefficients d'anisotropie magnétique (Programme SPSRM 370 A). L'algorithme optimal a montré que le type d'expérience employé ne permettait pas d'atteindre le deuxième coefficient d'anisotropie.

C. SYSTÈMES NON LINÉAIRES. — Séparation des composantes de multiplets mal résolus (Programme SPSRM 388).

Définition et orientation du plan moléculaire moyen (Programme SPSRM 344) (1966 d) [22].

Constantes réticulaires pour les systèmes monocliniques et tricliniques (Programme SPSRM 379).

Détermination des coefficients d'extinction dans des cristaux absorbants de tailles différentes (Programme SPSRM 321 A).

Commande auto-adaptative d'un spectromètre explorant des multiplets (Programme SPSRM 353).

Détermination de l'énergie et de la largeur du niveau d'excitation des plasmons à partir des pertes d'énergie d'un faisceau d'électrons traversant une lamelle métallique (Programme SPSRM 381).

Signalons enfin que l'algorithme de minimisation utilisé pour minimiser ε a été appliqué par Bertinotti (1965) [17] pour résoudre la structure de la paratoluidine. La fonction minimisée par cet auteur était une combinaison du facteur R de reliabilité et du potentiel V intermoléculaire. Cette fonction $R + \lambda V$ est voisine de la fonction ε intervenant dans l'algorithme optimal. En effet, ε fait intervenir la probabilité des perturbations des observations comme le fait R . D'autre part, ε fait aussi intervenir la probabilité des distances interatomiques comme le fait V . L'algorithme optimal d'ailleurs leverait l'arbitraire de la constante λ , puisqu'il travaille dans l'espace métrique Σ .

L'adjonction des informations *a priori* contenues dans V stabilise l'affinement en supprimant des minimums secondaires de R . Les cuvettes parasites de R se trouvent inclinées vers une solution raisonnable lorsqu'on ajoute λV , c'est-à-dire les informations *a priori*. L'algorithme optimal permet de comprendre comment et pourquoi l'affinement qui l'utilise possède un plus grand rayon de convergence, s'initialise facilement, converge sans difficulté et atteint une solution plus exacte et plus précise.

2. Conclusion. — L'étude des propriétés théoriques et la constatation des qualités pratiques de l'algorithme optimal ont montré qu'il présentait les points d'intérêt suivants :

1) Les informations *a priori* sur les inconnues peuvent être prises en compte dans les calculs.

2) Des expériences relevant de disciplines différentes peuvent être traitées avec fruit simultanément si elles ont des inconnues en commun.

3) L'influence des erreurs d'observation sur les résultats est évaluée et atténuée. L'opérateur \mathcal{B} obtenu conduit à modifier profondément la plupart des méthodes numériques connues.

4) Les valeurs optimales des paramètres \mathbf{p}^* libres de \mathcal{A} déterminent les meilleures conditions expérimentales et permettent la commande corrigée des appareils.

5) Les paramètres de qualité donnent une mesure de la validité de la description du phénomène physique qui cherche à justifier les observations à partir des inconnues explicatives.

La nouveauté du point de vue, plus peut-être que la formulation de cet algorithme, semble un guide précieux dans la conduite des expériences et dans leur exploitation numérique.

3. **Remerciements.** — Je remercie MM. R. Fortet et H. Curien pour leurs judicieux avis et leurs encouragements.

4. Principales notations. Généralités :

SYMBOLE	SIGNIFICATION	EXEMPLE
—	—	—
Lettre minuscule	Scalaire, indice	
Minuscule pointée grasse	Vecteur	\mathbf{x}^*
Majuscule grasse italique	Matrice, opérateur linéaire	\mathbf{A}
Majuscule cursive	Opérateur non linéaire	\mathcal{A}
Grecque minuscule	Variable aléatoire	ξ
Grecque majuscule	Espace	Ξ
Parenthèses	Relation fonctionnelle	$\mathcal{A}(\mathbf{x}^*)$
Crochets	Limites d'une expression	$[\mathbf{z} - \mathbf{x}^*] M[\mathbf{z} - \mathbf{x}^*]$
$\tilde{\mathbf{A}}$	Matrice transposée de \mathbf{A}	
$\tilde{\mathbf{x}}$	Vecteur ligne transposé de \mathbf{x}^*	
$\tilde{\mathbf{y}}^*$	Valeur centrale de \mathbf{y}^*	
A_{ji}	Élément d'indices j et i	

SIGNIFICATION DES SYMBOLES

a_j	: Élément de filtre instrumental.	\mathbf{x}_c^*	: Estimations <i>a priori</i> des inconnues, valeurs centrales de leur loi de probabilité.
A_{ji}	: Élément de la matrice instrumentale.	\mathbf{p}^*	: Paramètres de commande instrumentale.
$b_j B_{ij}$: Élément de l'opérateur d'estimation.	\mathbf{q}^*	: Paramètres libres de la méthode de calcul.
f	: Fonction $\bar{\varphi}/\bar{\varepsilon}$.	\mathbf{s}^*	: Échantillons de bruit de fond.
i	: Indice des inconnues.	u_i	: Vecteur unitaire dont la $i^{\text{ème}}$ composante vaut 1.
j	: Indice des observations.	\mathbf{x}^*	: Valeurs vraies des inconnues.
n_x	: Nombre d'inconnues.	\mathbf{y}^*	: Vecteur des observations.
n_y	: Nombre d'observations.	\mathbf{z}^*	: Évaluations des inconnues.
p	: Densité de probabilité.	$\bar{\delta}$: Erreur systématique.
r	: Pente.	ε	: Fonction de coût.
s	: Échantillon de la variable aléatoire ζ .	$\bar{\varepsilon}$: Erreur totale.
t	: Abscisse.	σ	: Écart type.
x_i	: $i^{\text{ème}}$ inconnue.	ξ^*	} Variables aléatoires.
y_j	: $j^{\text{ème}}$ observation.	η^*	
z_i	: Évaluation de la $i^{\text{ème}}$ inconnue.	σ^*	
\mathbf{A}	: Matrice de l'application linéaire des inconnues sur les observations.	Ξ	: Espace affine des inconnues.
\mathbf{B}	: Opérateur d'évaluation des inconnues.	Π	: Région permise de l'espace affine pour les évaluations.
\mathbf{M}	: Matrice carrée définie positive.	\mathbf{H}	: Espace affine des observations.
\mathcal{A}	: Opérateur instrumental.	Σ	: Espace métrique du bruit.
\mathcal{B}	: Estimateur numérique.		
\mathcal{C}	: Application du bruit engendrant les inconnues.		
\mathcal{Y}	: Application du bruit sur les observations.		

5. Liste des hypothèses :

- H_1 : $\begin{bmatrix} \mathcal{X} \\ \mathcal{Y} \end{bmatrix}^{-1}$ existe.
 H_2 : $\mathcal{X}(\mathbf{s}^*)$ et $\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*)$ sans corrélations.
 H_3 : $\mathcal{Y}(\mathbf{s}^*)$ jamais non laplacien et non blanc.
 H_4 : $\mathcal{X}(\mathbf{s}^*)$ diagonal.
 H_5 : \mathcal{A} résulte de l'échantillonnage d'une fonction.

- H_6 : Les abscisses d'échantillonnage sont incertaines.
 H_7 : L'échantillonnage est assez serré pour que $\sum \delta_i \delta_{i+1} \cong \sum \delta_i^2$.

A l'exception de la première, ces hypothèses définissent des cas particuliers qui permettent une exploitation statistique plus poussée. Elles ne sont pas essentielles pour l'application de l'algorithme optimal.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] LEGENDRE (A. M.), « Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes », Paris, 1806, p. 78.
[2] GAUSS (K. F.), « Theoria motus corporum coelestium », Hambourg, 1809, p. 177.
[3] « Disquisitio de elementis ellipticis Palladis », 1810. LAPLACE (P. S.), « Théorie analytique des probabilités », Paris, 1812, 2, 4.
[4] GAUSS (K. F.), « Theoria combinationis observationum erroribus minimis obnoxia », *Werke*, 1821, 4, 1.
GERLING (C. L.), « The application of the calculus of compensation to practical geometry », 1843, p. 383.
GAUSS (K. F.), *Werke*, 1844, 8, 147.
JACOBI (C. G. L.), *Ast. Nach.*, 1845, 523, 297.
CAUCHY (A.), « Méthode générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées », *C. R. Acad. Sci. Paris*, 1847, 25, 536-538.
SEIDEL (P. L.), *München Abh.*, 1863, 9.
PIZZETTI (P.), « I fondamenti mat. per la critica dei risultati sperimentali », *Atti dell R. Univ. di Genova per il centenario Colombiano*, 1892, p. 113-334.
SEELIGER (N. H.), *Ast. Nach.*, 1893, 132, 209.
SCHIAPARELLI (G.), *Rend. Ist. Lombardo*, 1907 a (2), 40, 752 ; *Ast. Nach.*, 1907 b, 176, 205.
POINCARÉ (H.), « Calcul des probabilités », 1908, p. 155.
MEIDEL (B.), *Zeit für Math. u. Phys.*, 1908, 56, 77.
BROGGI (U.), « L'enseignement mathématique », 1909, 11, 14.
SCHIMMACK (R.), *Math. Ann.*, 1909, 68, 125.
BERNSTEIN (F.) et BAER (W. S.), *Math. Ann.*, 1915, 76, 284.
WIENER (N.), *Acta Math.*, 1930, 55, 118.
COHEN (M. U.), *Rev. Sci. Instr.*, 1935, 6, 68.
COHEN (M. U.), *Zeit. Krist.*, 1936, 94, 288-306.
[5] WIENER (N.), « The extrapolation, interpolation and smoothing of stationary time series », NDRC Report, Cambridge, 1942.
[6] DANTZIG (G. B.), « Programming of Interdependent Activities II Mathematical Model », *Econometrica*, 1949, 17, 3, 220 ; 4, 211.
PLACKET (R. L.), « A historical note on the method of least-squares », *Biometrika*, 1949, 36, 458-460 ; « Some theorems in least-squares », *Biometrika*, 1950, 37, 149-157.
HESS (J. B.), *Acta Crystal.*, 1951, 4, 209.
[7] TOURNARIE (M.), *C. R. Acad. Sci. Paris*, 1956, 242, 2509 ; *C. R. Acad. Sci. Paris*, 1957, 245, 1301.
[8] *Bull. Soc. Franc. Minér. Crist.*, 1958 a, 81, 278.
[9] Actes du 2^e Congrès international de Cybernétique, Namur, 1958 b, p. 315.
[10] Thèse, Paris, 1959.
KALMAN (R. E.) « A new approach to linear filtering and predictor problems », *Trans. A.S.M.E. Basic Engineering*, 1960, 82 D, 35-45.
[11] GAUGENOT (J.), GUILLOU (A.) et LAGO (B.), Rapport S-CEA n° 106, 1961, C.E.N.S.
[12] TOURNARIE (M.), Actes du 4^e Congrès international de Cybernétique, Namur, 1964 a.
[13] « Le sens de la mesure », *Bull. Soc. Sci. de Bretagne*, 1964 b, 39, 148.
[14] « Le lissage optimisé », *J. Physique*, 1964 c, 25, 909.
[15] Colloque sur les calculs cristallographiques, Grenoble, 1965.
[16] BIBIAN (F.), Colloque sur les calculs cristallographiques, Grenoble, 1965.
[17] BERTINOTTI (A.), Thèse, Paris, 1965.
[18] NELDER (J. A.) et MEAD (R.), *The Computer Journal*, 1965, 7, 308.
[19] BIBIAN (F.), Thèse, Nancy, 1966.
BIBIAN (F.) et TOURNARIE (M.), Rapport SPSRM n° 31, 1966, C.E.A.
TOURNARIE (M.), Actes du 7^e Congrès international de Cristallographie, Moscou, 1966, p. A 235.
TOURNARIE (M.), World list of cristallographic computer programs.
[20] 1966 a, Programme n° 7025, 20 (SPSRM 307 C) ; 1966 b, Programme n° 7020, 21 (SPSRM 341 A).
[21] 1966 c, Programme n° 7024, 22 (SPSRM 306 H).
[22] 1966 d, Programme n° 7029, 23 (SPSRM 344 E) ; 1966 e, Programme n° 7027, 44 (SPSRM 310 D) ; 1966 f, Programme n° 7026, 47 (SPSRM 308 B).
[23] TOURNARIE (M.), *C. R. Acad. Sci. Paris*, 1968 a, 1006-1008.
[24] TOURNARIE (M.) « Exploitation d'une observation isolée pour l'estimation de plusieurs inconnues », *Ann. Inst. H.-Poincaré*, 1968 b (à paraître).