Chapitre 4 : Moindres carrés

I] Introduction.

Systèmes linéaires avec plus d'équations que d'inconnues :

$$Ax = b$$

avec A une matrice rectangulaire $m \times n$

$x \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}^m$. avec $m > n$

⇒ On a un système surdéterminé. En général, il n'y a pas de solution.

On veut quand même trouver x tq $Ax \approx b$. L'idée des moindres carrés est de chercher x qui va minimiser la fonction erreur :

$$E(x) = \|Ax - b\|^2$$

le vecteur x est alors solution du système $Ax = b$ au sens des moindres carrés.

Exemple : droite de régression linéaire.

II] Mise d'un problème sous-forme de moindres carrés.

On considère deux grandeurs physiques t et y reliées entre elles par une relation $y = f(t)$. On ne connaît pas f, mais on a une vague idée de la forme de cette fonction qui peut convenir (droite, polynôme, ...)

Par exemple :

$$f(t) = x_0 + x_1 t$$

$$f(t) = x_0 + x_1 t + \dots + x_n t^n$$

$$f(t) = x_0 + x_1 \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) + x_2 \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right) + x_3 \sin\left(\frac{4\pi t}{T}\right) + \dots$$

On veut déterminer les paramètres x_i. Les fonctions f sont des modèles linéaires en les paramètres x_i

De façon générale, on peut considérer n fonctions $(\phi_j)_{1 \le j \le n}$ et on cherche la fonction f comme une combinaison linéaire des ϕ_j.

$$f(t) = x_1 \phi_1(t) + \dots + x_n \phi_n(t) = \sum_{j=1}^{n} x_j \phi_j(t).$$

Pour déterminer les x_i, on effectue m mesures $(t_i, y_i)_{1 \le i \le m}$.
et on cherche à minimiser les écarts quadratiques entre les mesures et le modèle

$$\min_{x_i} \sum_{i=1}^{m} |f(t_i) - y_i|^2. \qquad \text{On note } x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$$

$$\text{et} \quad E(x) = \sum_{i=1}^{m} |f(t_i) - y_i|^2$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} x_j \phi_j(t_i) - y_i \right)^2$$

On introduit la matrice $A (m \times n)$ avec $a_{ij} = \phi_j(t_i)$

$$A = \begin{bmatrix} \phi_1(t_1) & \phi_2(t_1) & \dots & \phi_n(t_1) \\ \phi_1(t_2) & \phi_2(t_2) & \dots & \phi_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_1(t_m) & \phi_2(t_m) & \dots & \phi_n(t_m) \end{bmatrix}$$

Ainsi, $f(t_i) = \sum_{j=1}^{n} x_j \phi_j(t_i) = (Ax)_i$ et $E(x) = \sum_{i=1}^{m} \left((Ax)_i - y_i \right)^2$

$$= \| Ax - y \|^2$$

Donc $E(x) = \|Ax - y\|^2$

où $y = (y_1, \dots, y_m)^T \in \mathbb{R}^m$

Définition : (Problème de moindres carrés).

Soit une matrice A de taille $m \times n$, $m \geq n$ et $b \in \mathbb{R}^m$ donnés
$A \in \mathcal{M}_{m,n}(\mathbb{R})$.

Problème : trouver $x \in \mathbb{R}^n$ qui minimise $E(x) = \|Ax - b\|^2$.

III Exemples.

① quantité : $z = f(t)$ avec le modèle $f(t) = a + bt + ct^2 + dt^3$.
On mesure $(t_i, z_i)_{1 \leq i \leq m}$

Problème : $v = (a, b, c, d)^T \in \mathbb{R}^4$

$$E(v) = \|Av - z\|^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(f(t_i) - z_i \right)^2$$

On a $z = (z_1, \dots, z_m)^T \in \mathbb{R}^m$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & t_1^3 \\ 1 & t_2 & t_2^2 & t_2^3 \\ \vdots & & & \\ 1 & t_m & t_m^2 & t_m^3 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{m,4}(\mathbb{R})$$

② Droite de regression linéaire

$f(x) = a + bx$, m mesures $(x_i, y_i)_{1 \le i \le m}$.

$\min_{u \in \mathbb{R}^2} \|Au - y\|^2$ $\quad u = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$; $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$

et $\quad A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{m,2}(\mathbb{R})$

IV] Résolution du problème des moindres carrés. Équations normales

→ ① Rappels de calcul différentiel dans $\mathbb{R}^n$.

On considère une fonction $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Définition 1 : On dit que f est dérivable en $x \in \mathbb{R}^n$ s'il existe une forme linéaire ($v : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$) tq :

$$f(x+h) = f(x) + vh + \|h\| \varepsilon(h) \quad , \ h \in \mathbb{R}^n.$$

où $\varepsilon(h) \xrightarrow[\|h\| \to 0]{} 0$

la forme v est la dérivée de f en x et est notée $f'(x)$.
ou encore gradient de f en x, noté $\nabla f(x)$.

Remarque : $vh = v(h)$

Matriciellement, la forme linéaire v se représente par un vecteur ligne

$$f'(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right) \in \mathbb{R}^n.$$

MN
25

Définition 2 : Dérivée directionnelle

On dit que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ admet une dérivée directionnelle dans la direction $d \in \mathbb{R}^n$ ssi la limite

$$\lim_{t \to 0} \frac{f(x+td) - f(x)}{t} \text{ existe.}$$

Autrement dit, ssi la fonction $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$
$t \mapsto f(x+td)$ est dérivable en $t=0$

On note $Df(x,d)$ la dérivée directionnelle de f en x, dans la direction d.

On montre que si f est dérivable en x (definition 1) alors f admet des dérivées directionnelles et $f'(x).d = Df(x,d)$.

Dérivées partielles : Direction de la base canonique $e^i = (0,..0,\underset{i\text{ème}}{1},0,...0)$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = f'(x).e^i = Df(x,e^i)$$

↳ dérivée partielle de f par rapport à x_i

$$f'(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right) = \nabla f(x).$$

Définition 3 : • On dit que $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ est un minimum local de $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ ssi il existe une boule $B(\bar{x}, r)$ centrée en $\bar{x}$ et de rayon r tq

$$f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in B(\bar{x}, r)$$

• On dit que $\bar{x}$ est un minimum global ssi

$$f(\bar{x}) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Théorème : On suppose f dérivable sur $\mathbb{R}^n$

① Une condition nécessaire pour que $\bar{x}$ soit un minimum local de f est $f'(x) = 0$

② Si f est strictement convexe et s'il existe $\bar{x}$ tq $f'(\bar{x}) = 0$ alors $\bar{x}$ est le minimum global de f.

Rappel : f est strictement convexe ssi :

$$f\big((1-\theta)x + \theta y\big) < (1-\theta) f(x) + \theta f(y).$$

$\forall \theta \in]0, 1[, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n, \ x \neq y$

⇒ ② Equations normales.

Soit $E(x) = \|Ax - b\|^2$ et on cherche x qui réalise $\min_{x \in \mathbb{R}^n} E(x)$.

hypothèse : On suppose que les colonnes de la matrice A sont linéairement indépendantes : i-e : $\ker A = \{0\}$

Proposition : E est une forme quadratique, strictement convexe et dérivable. $E'(x) = 2(A^T A x - A^T b)^T$

Corollaire : E admet un unique minimum global $\bar{x}$ qui est la solution des équations normales.

$$A^T A x = A^T b.$$

Preuve : Calcul de E'

$E : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$

$$E'(x) = \left(\frac{\partial E}{\partial x_1}(x), \dots, \frac{\partial E}{\partial x_m}(x) \right) = \nabla E(x)$$

gradient de E.

$\frac{\partial E}{\partial x_i}(x)$: dérivée partielle par rapport à x_i. [vecteur ligne]

- dérivée partielle par rapport à x_i : $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $x_i \mapsto E(x)$.
- dérivée directionnelle :

$$DE(x, d) = \frac{d}{dt} \left[E(x + td) \right]_{|t=0}.$$

On a $DE(x, d) = \nabla E(x) \cdot d = (\quad)(\quad)$.

(produit scalaire)

En particulier $DE(x, e^i)$ e^i : i ème vecteur de la base canonique.

$$= \nabla E(x) \cdot e^i = \frac{\partial E}{\partial x_i}(x)$$

$$E(x) = \|Ax - b\|^2 = \langle Ax - b \mid Ax - b \rangle$$
$$= \langle Ax \mid Ax \rangle - \langle Ax \mid b \rangle - \langle b \mid Ax \rangle + \langle b \mid b \rangle.$$
$$= \langle x \mid A^T A x \rangle - 2 \langle x \mid A^T b \rangle + \|b\|^2.$$

On pose $G = A^T A$ et $c = A^T b$.

On doit calculer les dérivées de $f_1(x) = \langle Gx | x \rangle$
et $f_2(x) = \langle x | c \rangle$

Calcul de $f_2'(x)$:

$f_2(x) = \langle x | c \rangle = x_1 c_1 + \dots + x_m c_m$.

$\frac{\partial f_2}{\partial x_i}(x) = c_i$

avec la dérivée directionnelle : $f_2(x+td) = \langle x+td | c \rangle$
$t \in \mathbb{R}$ $= \langle x | c \rangle + t \langle d | c \rangle$.

$\frac{d}{dt}\left[f_2(x+td)\right]_{|t=0} = \langle d | c \rangle = \partial f_2(x,d) = \nabla f_2(x) \cdot d$
$= \langle d | \nabla f_2(x)^T \rangle$.

$\Rightarrow \nabla f_2(x) = c^T$.

Calcul de $f_1'(x)$

$f_1(x) = \langle Gx | x \rangle = \sum_i (Gx)_i x_i = \sum_i \left(\sum_j G_{ij} x_j \right) x_i$.

$f_1(x+td) = \langle G(x+td) | x+td \rangle$
$= \langle Gx | x \rangle + t \langle Gx | d \rangle + t \langle Gd | x \rangle + t^2 \langle Gd | d \rangle$.
$= \langle Gx | x \rangle + t \langle (G+G^T)x | d \rangle + t^2 \langle Gd | d \rangle$.

$\frac{d}{dt}\left[f_1(x+td)\right] = \langle (G+G^T)x | d \rangle + 2t \langle Gd | d \rangle$.

$\partial f_1(x,d) = \frac{d}{dt}\left[f_1(x+td)\right]_{t=0} = \langle (G+G^T)x | d \rangle = \nabla f_1(x) \cdot d$.

$\Rightarrow \nabla f_1(x) = \left[(G+G^T)x\right]^T$.

Avec $G = A^TA$ $(G^T = G)$. , $c = A^Tb$

$$E(x) = \langle A^TA\,x \mid x \rangle - 2\langle x \mid A^Tb \rangle + \|b\|^2.$$
$$E'(x) = \left((G+G^T)x - 2A^Tb\right)^T.$$
$$= 2\left(A^TA\,x - A^Tb\right)^T. \qquad \text{cqfd}$$

Remarques: ① Le corollaire est vrai sur l'hypothèse que $\mathrm{Ker}\,A = \{0\}$.
Sans cette hypothèse, la matrice A^TA est inversible.
En fait, elle est définie positive : $\langle A^TAx \mid x \rangle > 0$, $\forall x \neq 0$

A^TA est inversible (car de taille $n \times n$)
Soit x, $A^TAx = 0$ on a nécessairement $x = 0$. sinon contradictoire!

② On a toujours $\bar{x}$ réalise $\min_x \|Ax - b\|^2 \iff A^TA\bar{x} = A^Tb$. $\Big\}$ ← (sans l'hypothèse $\mathrm{Ker}\,A = \{0\}$)

Sans l'hypothèse $\mathrm{Ker}\,A = \{0\}$, on n'a plus unicité, mais on peut montrer que les équations normales ont toujours au moins une solution.

V] Résolution des moindres carrés par décomposition QR.

① Moindres carrés et décomposition QR

Théorème: Soit une matrice A de taille $m \times n$, $m \geq n$.
Il existe une matrice Q de taille $m \times m$, orthogonale ($Q^{-1} = Q^T$) et une matrice R de taille $m \times n$, triangulaire supérieure telles que $A = QR$.

Preuve : par les transformations de Householder

Une fois connue la décomposition $A = QR$, on résout les moindres carrés de la façon suivante.

$$E(x) = \|Ax - b\|^2 = \|QRx - b\|^2 = \|Q(Rx - Q^T b)\|^2$$
$$= \|Rx - Q^T b\|^2 \qquad \text{[car } QQ^T = Id\text{]}$$

car $\|Qy\|^2 = \langle Qy \mid Qy \rangle$
$= \langle y \mid Q^T Q y \rangle = \|y^2\|$.

Avec $R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix}$ où $\tilde{R}$ matrice triangulaire supérieure de taille $n \times n$.

et on note $c = Q^T b = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \updownarrow n \\ \updownarrow m-n \end{matrix}$

Ainsi, $Rx - Q^T b = \begin{pmatrix} \tilde{R}x - c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \updownarrow n \\ \updownarrow m-n \end{matrix}$

$$\Rightarrow E(x) = \|\tilde{R}x - c_1\|^2 + \|c_2\|^2.$$

Hypothèse : On fait l'hypothèse que $\ker A = \{0\}$.
Dans ce cas, la matrice $\tilde{R}$ est inversible :
soit x, $\tilde{R}x = 0$, alors $Rx = 0$ et donc
$Ax = QRx = 0 \Rightarrow x = 0$

Sous l'hypothèse $\ker A = \{0\}$, trouver $\bar{x}$ qui réalise $\min_x E(x) \Leftrightarrow \tilde{R}x = c_1$.

Ce système $\tilde{R}x = c_1$ est facile à résoudre car $\tilde{R}$ triang. sup.

Remarque : sous Matlab,

A\b avec A de taille m x n, m > n.
on obtient la solution au sens des moindres carrés par une décomposition QR.

*. Les matrices orthogonales sont très bien conditionnées.

$$\text{cond}_2(Q) = \|Q\|_2 \, \|Q^T\|_2 = 1.$$

② Transformation de Householder et décomposition QR.

Décomposition QR.

- Comme pour LU, on essaie de mettre des 0 sous la diagonale de A.
- A chaque étape de l'algorithme, on a :
  $A^{(q)} = H^{(q)} A^{(q-1)}$ où $H^{(q)}$ est une matrice orthogonale.
- Au bout de n étapes, on obtient la décomposition QR
  avec $Q^T = H^{(n)} \dots H^{(1)}$ orthogonale.

$$A = \begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} \quad A^{(1)} = \begin{pmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & x & x \end{pmatrix} \quad A^{(2)} = \begin{pmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & x \end{pmatrix} \quad A^{(3)} = \begin{pmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R.$$