Chapitre 5 :

Modélisation paramétrique

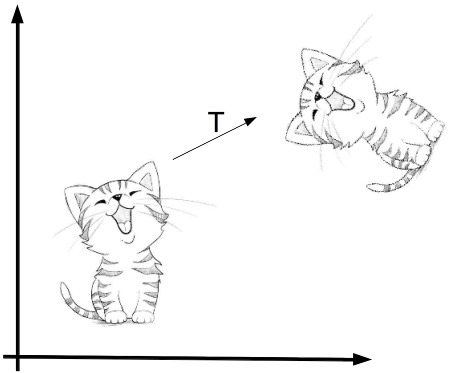
M1 informatique - tronc commun

Les problèmes d'optimisation ne sont pas toujours directement formulables en fonctionnelles et peuvent être basés sur les données. L'objectif est alors de pouvoir estimer les paramètres permettant d'expliquer ces données.

Trouver $\hat{\beta}$ revient à résoudre un problème de régression (d'optimisation) **aux moindres carrés** :

$$\min_{\beta} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \|y_i - f(x_i, \beta)\|^2$$

où β est un vecteur de paramètres à estimer, x_i et y_i sont des données et f une fonction fournie.



On souhaite modéliser le problème consistant à trouver la transformation affine T liant deux ensembles de points dans $\mathbb{R}^2$:

$$\begin{bmatrix} u_i' \\ v_i' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

- Inconnues : $\beta = [a_1 \;\; a_2 \;\; a_3 \;\; b_1 \;\; b_2 \;\; b_3]^T$
- Données : $\begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix}$ et $\begin{bmatrix} u_i' \\ v_i' \end{bmatrix}$, $\forall i \{1, .., n\}$.
- Fonction fournie : transformation affine T définie par :

$$\begin{bmatrix} u_i' \\ v_i' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ v_i \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

On cherche donc la solution du problème d'optimisation aux moindres carrés suivant :

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{\mathbf{6}}} \frac{1}{2} \|A\beta - b\|_2^2$$

$\Rightarrow$ Formulation des problèmes aux moindres carrés

Moindres carrés ordinaires ou régression en distance verticale

Hypothèses :

- les entrées sont sans erreur : $\widetilde{x}_i = x_i$
- les sorties sont affectées d'erreurs additives : $\widetilde{y}_i = y_i + \Delta y_i$.

Problème : Chercher l'estimateur $\hat{\beta}$ revient à:

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^{n} \|\widetilde{y}_i - f(x_i, \beta)\|^2$$

Illustration en 2D

On cherche la courbe qui minimise conjointement les résidus $\|\widetilde{y}_i - f(x_i, \beta)\| = \Delta y_i$ qui correspondent aux distances verticales entre les points $(\tilde{x}, \tilde{y})$ et la courbe.

Moindres carrés orthogonaux ou régression en distance orthogonale

Hypothèses : Les entrées et les sorties sont affectées d'erreurs additives (modèles EIV "Errors In Variables").

$$\begin{cases} \widetilde{x_i} = x_i + \Delta x_i \\ \widetilde{y_i} = y_i + \Delta y_i \end{cases}$$

Problème : Il s'agit d'estimer simultanément $\hat{\beta}$ et les erreurs $\widehat{\Delta x_i}$:

$$\min_{\beta, \Delta x_i} \sum_{i=1}^{n} \| \overbrace{f(\widetilde{x_i} - \Delta x_i, \beta) - \widetilde{y_i}}^{\Delta y_i} \|^2 + \|\Delta x_i\|^2$$

Illustration en 2D

Il est clair que : $\Delta y_i = \widetilde{y_i} - f(\widetilde{x_i} - \Delta x_i, \beta)$. Or d'après l'ami Pythagore : $d^2 = \Delta x + \Delta y$. On cherche la courbe qui minimise conjointement les résidus $\sqrt{\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2}$ qui correspondent aux distances orthogonales entre les points $(\tilde{x}, \tilde{y})$ et la courbe.

Hypothèses :

- les entrées sont affectées d'erreurs additives : $\widetilde{x}_i = x_i + \Delta x_i$
- les sorties sont sans erreur.

Problème : il s'agit d'estimer simultanément $\hat{\beta}$ et $\widehat{\Delta x_i}$

$$\min_{\beta,\Delta x_i} \sum_{i=1}^{n} \|\Delta x_i\|^2$$

$$s.t\ y_i = f(\widetilde{x}_i - \Delta x_i, \beta)$$

$\Rightarrow$ Résolution des problèmes aux moindres carrés ?

Problème des moindres carrés ordinaires :

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|A\beta - b\|_2^2$$

Résolution :

Résolution des moindres orthogonaux

En général, il n'y a pas de solution analytique au problème de minimisation aux moindres carrés orthogonaux : une condition suffisante est que f ne soit pas bilinéaire.

Pour trouver quand même une solution analytique "approchée", on peut

1. "revenir" à un problème des moindres carrés ordinaires ou totaux et le resoudre ;
2. Chercher une solution itérative du problème aux moindres carrés orthogonaux en prenant comme point de départ la solution analytique de 1).