

TD 1 – Optimisation Formulation mathématique

⊳ Exercice 1. Régression linéaire simple

Soit n points expérimentaux $M_i = (x_i, y_i)$ pour i = 1, ..., n. On considère le modèle suivant : $y(x) = \beta_0 + \beta_1 x$. On désire estimer les paramètres par la méthode des moindres carrés.

1.1. On veut estimer les paramètres par les moindres carrés. Écrire le problème sous la forme :

$$\begin{cases} \min f(\beta) = \frac{1}{2} ||r(\beta)||^2 = \frac{1}{2} ||y - X\beta||^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^p \end{cases}$$

On donnera les valeurs de X et de y et à quoi correspond β .

- 1.2. On souhaite maintenant trouver la meilleure droite au sens des moindres carrés qui passe par l'origine. Écrire le problème d'optimisation.
- Exercice 2 (Courbe étalon). La première étape d'un dosage radio-immunologique consiste à établir une courbe étalon. Un dosage repose sur l'hypothèse qu'une hormone et son isotope marqué se comportent de façon équivalente vis-à-vis de leur anticorps spécifique : lorsque l'on met en présence une quantité déterminée d'anticorps, une quantité déterminée d'hormone radioactive et une quantité variable d'hormone froide, la dose de complexe anticorps-hormone marquée en fin de réaction est d'autant plus faible que la quantité d'hormone froide est importante. Néanmoins, la relation qui existe entre la dose d'hormone froide mise en réaction et la radioactivité de complexe extrait n'est pas stable et doit être appréciée dans chaque situation expérimentale. C'est l'objet de l'établissement de la courbe étalon, à partir d'une gamme de dilutions connues d'une quantité déterminée de l'hormone à doser. La table 1 donne les données recueillies pour une telle courbe dans le cas d'un dosage du cortisol : on a mesuré la radioactivité du complexe (en coups par minute ou cpm). On considère le modèle suivant :

$$y(x) = \beta_2 + \frac{\beta_1 - \beta_2}{(1 + \exp(\beta_3 + \beta_4 x))^{\beta_5}}.$$
 (1)

On désire estimer les paramètres par les moindres carrés (attention, il y a pour chaque dose 4 observations de y). On notera $(x_i)_{i=1,\dots,16}$ (respectivement $(y_{i,j})_{i=1,\dots,16;j=1\dots,4}$) les éléments de la première colonne (respectivement des 4 dernières colonnes) de la table 1 et $r_{i,j}(\beta)$ le résidu liés au point $(x_i, y_{i,j})$.

- **2.1.** Écrire le résidu lié au point (0.04, 2378).
- **2.2.** 1. Quelle est la dimension du vecteur des paramètres β .
 - 2. Quel est le nombre de points n?
- 2.3. Écrire le problème d'optimisation des paramètres par les moindres carrés.

Dose en ng/.1 ml	Réponse en c.p.m.				
0	2868	2785	2849	2805	
0	2779	2588	2701	2752	
0.02	2615	2651	2506	2498	
0.04	2474	2573	2378	2494	
0.06	2152	2307	2101	2216	
0.08	2114	2052	2016	2030	
0.1	1862	1935	1800	1871	
0.2	1364	1412	1377	1304	
0.4	910	919	855	875	
0.6	702	701	689	696	
0.8	586	596	561	562	
1	501	495	478	493	
1.5	392	358	399	394	
2	330	351	343	333	
4	250	261	244	242	
100	131	135	134	133	

Table 1 – Données pour un dosage de Cortisol

années	1900	1910	1920	1930	1940	1950	1960
pop.	75.995	91.972	105.711	123.203	131.669	150.697	179.323
années	1970	1980	1990	2000			
pop.	203.212	226.505	249.633	281.422			

Table 2 – Données provenant de "U.S. Census"

▶ Exercice 3. On donne ci-dessous la population des États Unis pour les années 1900 à 2000 ¹.

On désire ajuster ces données sur le modèle

$$y(t) = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + \beta_3 t^3$$

On utilise la méthode des moindres carrés.

- 3.1. Donner la formulation mathématique de ce problème et visualiser la fonction à minimiser.
- **3.2.** Écrire le problème sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} Min \quad f(\beta) = \frac{1}{2} \|r(\beta)\|^2 = \frac{1}{2} \parallel y - X\beta \parallel^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^p \end{array} \right.$$

On donnera les valeurs de X et de y et à quoi correspond β .

1. Exemple provenant du cours de Cleve Moler page 4 chap. 5 "Numerical computing with Matlab"

$\,\rhd\,$ Exercice 4. Maintenance d'un réseau de distribution 2

Un ingénieur responsable de la maintenance d'un réseau de distributeurs de boissons aimerait prédire le temps nécessaire pour l'approvisionner. Le service d'approvisionnement comprend le remplissage des machines et leurs réglages éventuels. Deux variables influencent ce temps : le nombre de caisses à charger et la distance parcourue par l'employé pour approvisionner l'ensemble des machines. Le responsable dispose de 25 observations, qui sont résumées dans le tableau suivant :

Obs.	Temps	Nb caisses	Dist.	Obs.	Temps	Nb. caisses	Dist.
1	16.68	7	560	13	13.50	4	255
\parallel 2	11.50	3	220	14	19.75	6	462
3	12.03	3	340	15	24.00	9	448
4	14.88	4	80	16	29.00	10	776
5	13.75	6	150	17	13.35	6	200
6	18.11	7	330	18	19.00	7	132
7	8.00	2	110	19	9.50	3	36
8	17.83	7	210	20	35.10	17	770
9	79.24	30	1460	21	17.90	10	140
10	21.50	5	605	22	52.32	26	810
11	40.33	16	688	23	18.75	9	450
12	21.00	10	215	24	19.83	8	685
				25	10.75	4	150

On désire ajuster à cet ensemble de données un modèle de régression multiple

$$y(x_1, x_2) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

où y est le temps requis, x_1 est le nombre de caisses utilisées et x_2 est la distance parcourue.

- 4.1. Donner la formulation mathématique de ce problème.
- **4.2.** Écrire le problème sous la forme :

$$\begin{cases} Min \quad f(\beta) = \frac{1}{2} ||r(\beta)||^2 = \frac{1}{2} ||y - X\beta||^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^p \end{cases}$$

On donnera les valeurs de X et de y et à quoi correspond β .

 \triangleright Exercice 5. La maquette d'un nouveau type d'éolienne est testé en soufflerie. 20 mesures sont réalisées entre 1 et 20 m/s. L'allure de la réponse suggère un modèle à rupture (cf. la figure 1)

La production y est modélisée en fonction du vent généré dans la soufflerie x de la façon suivante : entre 1 et 5m/s, la réponse est supposée constante, elle augmente linéairement entre 5 et 15 m/s, avant de saturer (redevenir constante) au delà de 15 m/s. Il y a bien sur continuité de la réponse aux points 5 et 15 m/s

^{2.} Exemple provenant du livre d'A. Antoniadis, J. Berruyer et R. Carmona, régression non linéaire et applications", editions Economica, p. 45

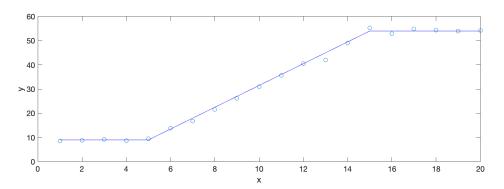


Figure 1 – Données et modèle pour une éolienne.

5.1. Écrire le modèle $y(x,\beta)$ en fonction des plages des valeurs de x. Quelle est la dimension de β .

5.2. Écrire le problème aux moindres carrés d'estimation des paramètres β . Ce problème est-il linéaire? Si oui on donnera le vecteur \mathbf{y} et la matrice \mathbf{X} permettant d'écrite le problème sous la forme

 $(P) \begin{cases} \min \frac{1}{2} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||^2 \\ \beta \in \mathbb{R}^p. \end{cases}$

\triangleright Exercice 6. Géoréférence d'une image satellite 3

On dispose d'une image satellite que l'on désire recaler par rapport à une carte géographique que l'on a à notre disposition. Pour cela on définit n points, appelés points d'amer, que l'on peut parfaitement faire correspondre sur la carte et sur l'image satellite. On prend par exemple un croisement de route, un point particulier sur une rivière... Concrètement on a donc à notre disposition n coordonnées (x_i, y_i) des n points d'amer sur la carte et n coordonnées (x_i', y_i') de ces mêmes points sur l'image satellite. On choisit d'exprimer ces coordonnées :

- en pixels pour les (x'_i, y'_i) (coordonnées (0,0) pour le coin inférieur gauche);
- en mètres relativement à un référentiel géodésique particulier pour les (x_i, y_i) , via une carte IGN par exemple.

On a par exemple les données suivantes :

Numéros	x_i	y_i	x_i'	y_i'
1	252	2661	458805	1831634
2	235	2603	458157	1830577
:	:	:	:	:
23	1021	2254	471301	1819574

En pratique l'image satellite est déformée par rapport à la réalité. Cette déformation a plusieurs origines : satellite non vertical par rapport à la prise de vue, présence de nuages dans

^{3.} Voir cours de C. Monteil

l'atmosphère... En conséquence on suppose que l'on peut écrire :

$$\begin{cases} x = \gamma_0 + \gamma_1 x' + \gamma_2 y' + \gamma_3 x'^2 + \gamma_4 x' y' + \gamma_5 y'^2 \\ y = \delta_0 + \delta_1 x' + \delta_2 y' + \delta_3 x'^2 + \delta_4 x' y' + \delta_5 y'^2 \end{cases}$$

On désire estimer les paramètres par les moindres carrées

- **6.1.** Pour l'estimation des paramètres $\gamma = (\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_5)$ quelles sont les données?
- **6.2.** Écrire le problème d'estimation par les moindres carrés linéaires de γ .
- **6.3.** Mêmes questions pour δ .
- \triangleright **Exercice 7.** On désire construire un réservoir de forme cylindrique de volume maximum dont la surface latérale est inférieure à S_{lat} et la surface totale est inférieure à S_{tot} .
 - 7.1. Formaliser le problème.
- \triangleright **Exercice 8.** Soit $B(a, \delta)$ la boule de centre a et de rayon $\delta > 0$ fixée. Soient p frères ennemis. On désire enfermer ces frères ennemis dans $B(a, \delta)$ en maximisant la distance minimale ξ qui les sépare deux à deux.
 - 8.1. Formaliser le problème.
- ▷ Exercice 9. On s'intéresse ici à la modélisation via un neurone formel.

Définition 1. Un neurone formel est une fonction paramétrée par n+1 paramètres w_1, \ldots, w_n, b :

$$g: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$$
$$(x, w, b) \longmapsto g(x, w, b) \coloneqq \sigma(\sum_{i=1}^n w_i x_i + b)$$

où σ est une fonction donnée qui s'appelle une fonction d'activation. Chaque paramètre w_i s'appelle le poids synaptique associé au signal d'entrée x_i .

On prendra dans la suite, sauf mention contraire, comme fonction σ la fonction tangente hyperbolique :

$$\sigma \colon \ \mathbb{R} \longrightarrow \ \mathbb{R}$$

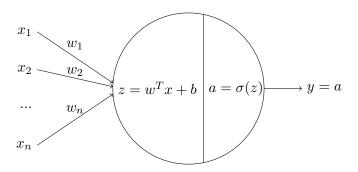
$$x \longmapsto \ \sigma(x) \coloneqq \frac{1 - e^x}{1 + e^x}.$$

La figure 2 schématise un neurone formel.

- 1. produit scalaire entre les entrées x et les poids synaptiques $w: w^T x$;
- 2. ajout d'une valeur de référence (biais b) : $z = w^T x + b$
- 3. application de la fonction d'activation à la valeur obtenue $z: a = \sigma(z)$

Définition 2. On a à notre disposition K points $x^k \in \mathbb{R}^n$ et $y^k \in \mathbb{R}$, on appelle apprentissage du neurone l'estimation par les moindres carrés des paramètres du neurone.

- **9.1.** Écrire le problème aux moindres carrés qui défini l'apprentissage. On donnera en particulier la fonction résidu r en précisant clairement l'espace de départ et l'espace d'arrivée.
- **9.2.** Ce problème est-il un problème aux moindres carrés linéaires ? Si oui, on donnera la matrice X.
- 9.3. Si on prend comme fonction d'activation σ l'identité, le problème au moindres carrés devient-il linéaire? Si oui, on donnera la matrice X.



 ${\bf Figure}\ 2-Repr\'esentation\ sch\'ematique\ d'un\ neurone.$