

# **Modélisation et inversion en géophysique**

## **5 - Inversion linéaire**

Bernard Giroux  
([bernard.giroux@ete.inrs.ca](mailto:bernard.giroux@ete.inrs.ca))

Institut national de la recherche scientifique  
Centre Eau Terre Environnement

Version 1.0.0  
Hiver 2019

## Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

# Régression linéaire

- La façon la plus courante de résoudre un problème d'inversion linéaire est basée sur la mesure de la distance entre les données observées  $\mathbf{d}^{\text{obs}}$  et les données prédites  $\mathbf{d}^{\text{pre}}$  ;
- Cette distance est fonction de l'erreur de prédiction, définie pour une  $i^{\text{e}}$  observation par

$$e_i = d_i^{\text{obs}} - d_i^{\text{pre}}. \quad (1)$$

- La méthode des moindres-carrés est l'approche la plus fréquente pour estimer les paramètres du modèle  $\mathbf{m}^{\text{est}}$  ;
  - On cherche dans ce cas les paramètres qui donneront l'erreur  $E$  la plus faible, où

$$E = \sum_{i=0}^{N-1} e_i^2 = \mathbf{e}^T \mathbf{e}. \quad (2)$$

- L'erreur  $E$  est la *distance euclidienne* au carré du vecteur  $\mathbf{e}$ .

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

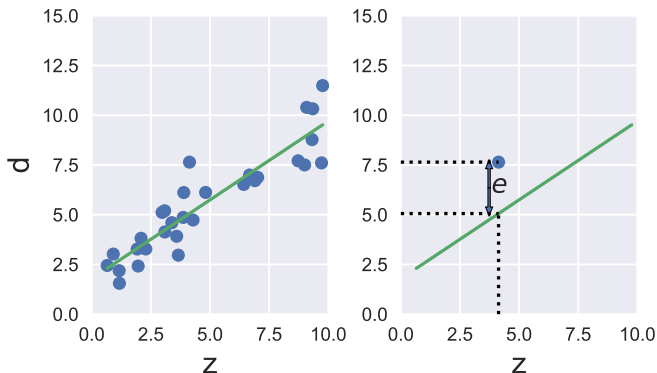
Hypothèses *a priori*

Varianse des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- L'exemple suivant montre l'ajustement de points par une droite, obtenu par moindres-carrés.



# Mesure de distance

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- La distance euclidienne est une mesure parmi d'autres;
  - On peut par exemple considérer la somme des valeurs absolues.
- On utilise *norme* pour désigner une mesure de distance;
- La norme d'un vecteur est notée  $\|\mathbf{e}\|$
- On dénombre :

$$\text{norme } L_1 : \quad \|\mathbf{e}\|_1 = \left[ \sum_i |e_i| \right] \quad (3)$$

$$\text{norme } L_2 : \quad \|\mathbf{e}\|_2 = \left[ \sum_i |e_i|^2 \right]^{1/2} \quad (4)$$

$$\text{norme } L_n : \quad \|\mathbf{e}\|_n = \left[ \sum_i |e_i|^n \right]^{1/n} \quad (5)$$

- Lorsque  $n \rightarrow \infty$ , seule la valeur la plus élevée a un poids non nul, i.e.

$$\text{norme } L_\infty : \quad \|\mathbf{e}\|_\infty = \max_i |e_i| \quad (6)$$

# Mesure de distance

Régression linéaire

Aperçu

**Distance**

Moindres-carrés

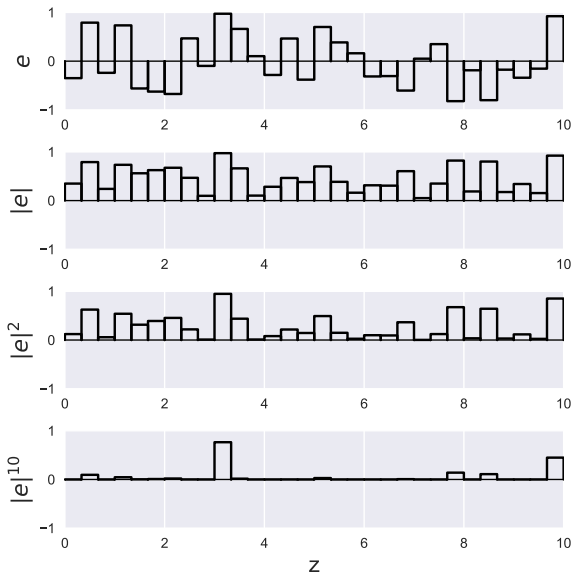
Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives



# Mesure de distance

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

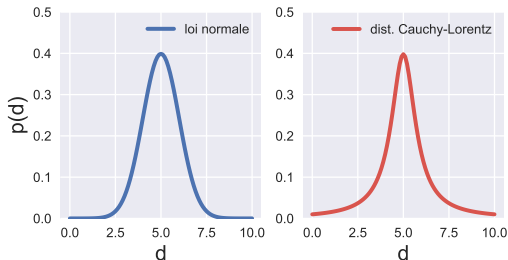
Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Le choix d'une norme dépend principalement de l'importance donnée aux données aberrantes;
- Une norme plus élevée donne un poids plus élevé aux erreur de prédiction  $e_i$  plus élevées.
- La norme  $L_2$  implique que les données sont distribuées selon une loi normale;
  - Une distribution normale est assez peu étalée.



# Mesure de distance

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

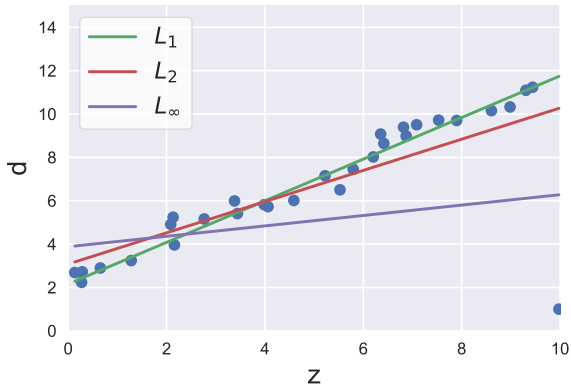
Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Si les données contiennent quelques points aberrants, la distribution sera plus étalée et les résultats peuvent être complètement erronés.





# Moindres-carrés pour une droite

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Une droite est définie par une ordonnée à l'origine ( $m_0$ ) et par une pente ( $m_1$ ), i.e.

$$d_i = m_0 + m_1 z_i. \quad (7)$$

- Il y a donc deux paramètres du modèle,  $M=2$ .
- Typiquement, on dispose de beaucoup plus que deux points, i.e.  $N > M$ .
- À moins que les points ne s'alignent parfaitement, on ne peut trouver une droite qui passe par tout les points ;
- On a affaire à un problème *surdéterminé*, il n'y a pas de solution pour laquelle  $\mathbf{e} = 0$ .

# Moindres-carrés pour une droite

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- On cherche alors une solution approximative, où le niveau d'approximation est défini par

$$E = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = \sum_{i=0}^{N-1} (d_i - m_0 - m_1 z_i)^2. \quad (8)$$

- On cherche donc le minimum de  $E(m_0, m_1)$ , qui est obtenu en égalant les dérivées de  $E$  à zéro et en solutionnant :

$$\frac{\partial E}{\partial m_0} = \frac{\partial}{\partial m_0} \sum_{i=0}^{N-1} (d_i - m_0 - m_1 z_i)^2 \quad (9)$$

$$= 2Nm_0 + 2m_1 \sum_{i=0}^{N-1} z_i - 2 \sum_{i=0}^{N-1} d_i = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial E}{\partial m_1} = \frac{\partial}{\partial m_1} \sum_{i=0}^{N-1} (d_i - m_0 - m_1 z_i)^2 \quad (11)$$

$$= 2m_0 \sum_{i=0}^{N-1} z_i + 2m_1 \sum_{i=0}^{N-1} z_i^2 - 2 \sum_{i=0}^{N-1} z_i d_i = 0. \quad (12)$$

# Moindres-carrés pour un probl. linéaire

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- On peut généraliser les moindres-carrés à n'importe quel système linéaire;
- L'erreur vaut alors

$$E = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = (\mathbf{d} - \mathbf{Gm})^T (\mathbf{d} - \mathbf{Gm}) = \sum_{i=0}^{N-1} \left[ d_i - \sum_{j=0}^{M-1} G_{ij} m_j \right] \left[ d_i - \sum_{k=0}^{M-1} G_{ik} m_k \right] \quad (13)$$

- En multipliant les termes et changeant l'ordre des sommations, on trouve

$$E = \underbrace{\sum_{j=0}^{M-1} \sum_{k=0}^{M-1} m_j m_k \sum_{i=0}^{N-1} G_{ij} G_{ik}}_{T_1} - 2 \underbrace{\sum_{j=0}^{M-1} m_j \sum_{i=0}^{N-1} G_{ij} d_i}_{T_2} + \underbrace{\sum_{i=0}^{N-1} d_i d_i}_{T_3} \quad (14)$$

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Les dérivées sont maintenant calculées
- Pour le 1<sup>e</sup> terme, on a

$$\frac{\partial T_1}{\partial m_q} = \sum_{j=0}^{M-1} \sum_{k=0}^{M-1} [\delta_{jq} m_k + m_j \delta_{kq}] \sum_{i=0}^{N-1} G_{ij} G_{ik} \quad (15)$$

$$= 2 \sum_{k=0}^{M-1} m_k \sum_{i=0}^{N-1} G_{iq} G_{ik} \quad (16)$$

où

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (17)$$

provient du fait que  $\partial m_i / \partial m_j$  vaut 1 si  $i = j$  et 0 si  $i \neq j$ .

# Moindres-carrés pour un probl. linéaire

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Pour le 2<sup>e</sup> terme, on a

$$-2 \frac{\partial T_2}{\partial m_q} = -2 \sum_{j=0}^{M-1} \delta_{jq} \sum_{i=0}^{N-1} G_{ij} d_i = -2 \sum_{i=0}^{N-1} G_{iq} d_i \quad (18)$$

- Le 3<sup>e</sup> terme ne contient pas de  $m$ , alors  $\frac{\partial T_3}{\partial m_q} = 0$ .
- En combinant les 3 termes, on trouve

$$\frac{\partial E}{\partial m_q} = 0 = 2 \sum_{k=0}^{M-1} m_k \sum_{i=0}^{N-1} G_{iq} G_{ik} - 2 \sum_{i=0}^{N-1} G_{iq} d_i \quad (19)$$

- Sous forme matricielle, cela donne

$$\mathbf{G}^T \mathbf{G} \mathbf{m} - \mathbf{G}^T \mathbf{d} = 0. \quad (20)$$

# Moindres-carrés pour un probl. linéaire

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Dans l'équation (20),  $\mathbf{G}^T \mathbf{G}$  est une matrice carrée de taille  $M \times M$  qui multiplie un vecteur  $\mathbf{m}$  de  $M$  éléments;
- $\mathbf{G}^T \mathbf{d}$  est aussi un vecteur de  $M$  éléments;
- En supposant que  $[\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1}$  existe, l'estimateur des paramètres du modèle est

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} \quad (21)$$

# Exercice – ajuster une droite

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Les commandes suivantes permettent de générer un ensemble de points plus ou moins alignés le long d'une droite :

```
N = 30
zmin = 0
zmax = 10
z = np.sort(zmin + zmax*np.random.rand(N, 1), axis=0)

a = 2.0
b = 1.0
m = np.asarray([a, b])
sd = 0.5
dobs = m[0] + m[1] * z + sd*np.random.randn(N, 1)

plt.plot(z, dobs, 'o')
plt.xlabel('z', fontsize=16)
plt.ylabel('d', fontsize=16)
plt.show()
```

# Exercice – ajuster une droite

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

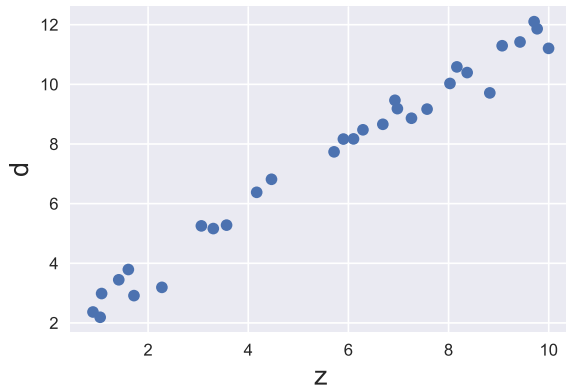
Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives





# Exercice – ajuster une droite

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Étapes à suivre :
  - Construire la matrice  $\mathbf{G}$ ;
  - Calculer  $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T \mathbf{G}$ ;
  - Calculer  $\mathbf{b} = \mathbf{G}^T \mathbf{d}_{\text{obs}}$ ;
  - Calculer l'inverse de  $\mathbf{A}$ ;
  - Calculer  $\mathbf{m}_{\text{est}} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b}$ .
- Visualisez le résultat avec

```
dpre = G.dot(mest)
```

```
plt.plot(z, dobs, 'o')
plt.plot(z, dpre, '-', linewidth=4)
plt.xlabel('z', fontsize=16)
plt.ylabel('d', fontsize=16)
plt.show()
```

# Exercice – ajuster une droite

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

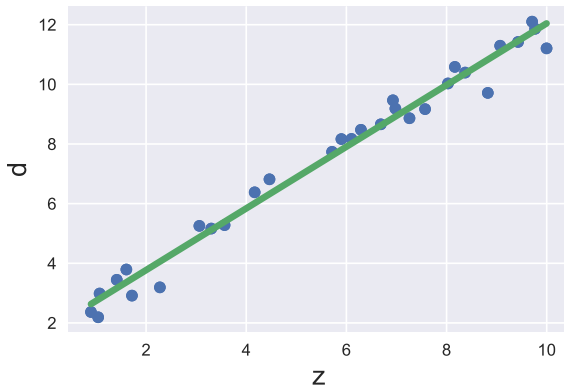
Existence de la solution

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives



# Existence de la solution moindres-carrés

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

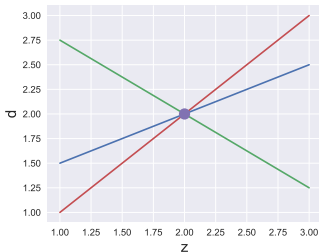
Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- La solution des moindres-carrés a été retenue parce qu'il n'y a pas de solution exacte à notre problème;
- C'est la méthode qui nous donne la "meilleure" solution, au sens où la norme  $L_2$  est minimisée;
- En utilisant  $\mathbf{m}^{\text{est}} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d}$ , on assume qu'il n'y a qu'une seule "meilleure" solution;
- La méthode échoue s'il existe plusieurs solutions qui donne la même erreur  $E$ .



Ajustement d'une droite avec un seul point :

- Une infinité de droites passe par le point;
- Pour chaque droite,  $E = 0$ .

# Existence de la solution moindres-carrés

Régression linéaire

Aperçu

Distance

Moindres-carrés

Existence de la solution

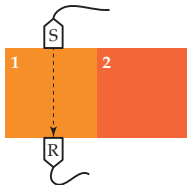
Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- On peut classer les problèmes inverses en fonction de l'information contenue dans le système  $\mathbf{Gm} = \mathbf{d}$
- Le problème est **indéterminé** (*underdetermined*) lorsque le nombre de paramètres  $M$  est supérieur au nombre de données indépendantes  $N$ ,  $M > N$ ;
  - La matrice  $[\mathbf{G}^T \mathbf{G}]^{-1}$  est singulière (non inversible).



- Lorsque  $M < N$ , le problème est **surdéterminé** (*overdetermined*);
  - Les moindres-carrés sont appropriés.

Régression linéaire

**Hypothèses *a priori***

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Hypothèses *a priori*

# Hypothèses *a priori*

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Lorsqu'un problème est indéterminé, il existe une infinité de solutions et **il faut ajouter une information au système** pour arriver à une solution satisfaisante;
- Cette information est nommée **information *a priori***;
  - Par exemple, pour ajuster une droite avec un seul point, on peut assumer que la droite doit passer à l'origine.
  - Un autre exemple est de supposer que les paramètres doivent être à l'intérieur d'une plage de valeurs donnée, e.g. des densités entre 1000 et 3500 kg/m<sup>3</sup>.
- Le choix d'une hypothèse *a priori* n'est pas toujours évident et dépend clairement de l'application.

# Problème purement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Une hypothèse *a priori* fréquente est que le modèle  $\mathbf{m}$  doit être "simple";
  - se justifie si on considère que les données seules sont insuffisantes.
- Une mesure de simplicité est la longueur euclidienne de  $\mathbf{m}$  :

$$L = \mathbf{m}^T \mathbf{m} = \sum m_i^2. \quad (22)$$

- Le problème devient celui de minimiser  $L$  sous la contrainte que  $\mathbf{e} = \mathbf{d} - \mathbf{Gm} = 0$ .
- La méthode des multiplicateurs de Lagrange permet de trouver la solution.
- La fonction à minimiser est

$$\Phi(\mathbf{m}) = L + \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i e_i = \sum_{i=0}^{M-1} m_i^2 + \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i \left[ d_i - \sum_{j=0}^{M-1} G_{ij} m_j \right] \quad (23)$$

où  $\lambda_i$  sont les multiplicateurs de Lagrange.

# Problème purement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Le minimum est obtenu en dérivant par rapport à  $m$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial m_q} = \sum_{i=0}^{M-1} 2 \frac{\partial m_i}{\partial m_q} m_i - \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i \sum_{j=0}^{M-1} G_{ij} \frac{\partial m_j}{\partial m_q} = 2m_q - \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i G_{iq} \quad (24)$$

- En égalant (24) à zéro, on obtient, sous forme matricielle

$$2\mathbf{m} = \mathbf{G}^T \boldsymbol{\lambda} \quad (25)$$

- En insérant dans  $\mathbf{d} = \mathbf{Gm}$ , on trouve

$$\boldsymbol{\lambda} = 2 [\mathbf{G}\mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{d} \quad (26)$$

qui nous permet de finalement trouver, *l'estimateur de longueur minimum*

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{G}^T [\mathbf{G}\mathbf{G}^T]^{-1} \mathbf{d} \quad (27)$$



# Exercice – Probl. purement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

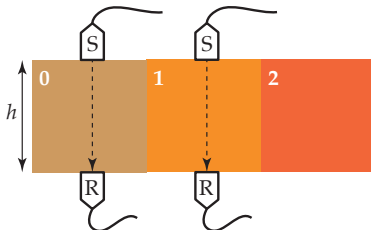
Égalité

Varianse des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Trouvez les paramètres du modèle de la figure suivante, pour  $h = 2$  et  $\mathbf{d}^{\text{obs}} = [0.5, 0.46]$ .



# Problème partiellement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

**Problème partiellement  
indéterminé**

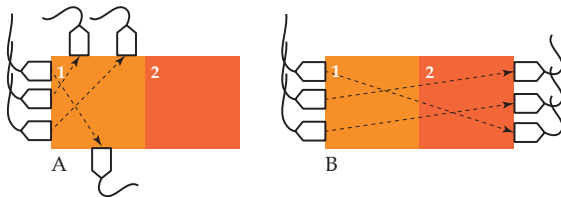
Pondération

Égalité

Varianse des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives



- En pratique, les problèmes inverses ne sont jamais complètement surdéterminés ou purement indéterminés.
  - Une cellule du modèle peut être traversée par plusieurs rais alors qu'une autre n'est traversée par aucun rai (A);
  - Si tout les segments de rais sont de la même longueur (B), seulement la lenteur moyenne peut être déterminée.

# Problème partiellement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Si le problème n'est pas trop indéterminé, on peut minimiser une combinaison de l'erreur de prédiction et de la longueur du modèle (indépendamment des paramètres individuels) :

$$\Phi(\mathbf{m}) = E + \varepsilon^2 L = \mathbf{e}^T \mathbf{e} + \varepsilon^2 \mathbf{m}^T \mathbf{m}, \quad (28)$$

où le poids  $\varepsilon^2$  détermine l'importance relative de  $L$  par rapport à  $E$ .

- Si  $\varepsilon$  est très élevé, l'emphasis est mise sur la partie indéterminée
  - se fait au détriment de  $E \rightarrow$  le modèle estimé sera loin du modèle vrai.
- Si  $\varepsilon$  est très faible, l'information *a priori* n'est pas propagée et la partie indéterminée le reste.
- En général, on cherche  $\varepsilon$  par essai-erreur.

# Problème partiellement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- En minimisant  $\Phi(\mathbf{m})$  par rapport aux paramètres du modèle, on trouve

$$[\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I}] \mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{G}^T \mathbf{d} \quad (29)$$

que l'on récrit

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = [\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{d} \quad (30)$$

- $\mathbf{m}^{\text{est}}$  est nommé solution des moindres-carrés *amortis* (*damped least squares*).
- La solution est stabilisée par l'amortissement, et on dit que le problème est *régularisé*.
  - On retrouve le terme *régularisation de Tikhonov* pour décrire ce type d'utilisation d'information *a priori*.

# Problème part. indéterminé – Exemple

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

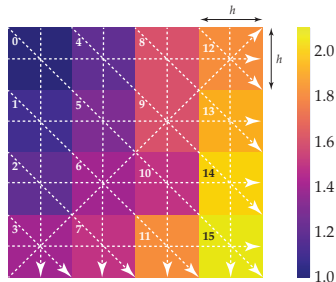
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Examinons un exemple de problème partiellement indéterminé.
- Le modèle comporte 16 paramètres;
- La taille  $h$  vaut 2;
- 16 mesures ont été effectuées.



# Problème part. indéterminé – Exemple

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Définition du modèle et des points de mesure.

```
mtrue = np.array([1.0, 1.1, 1.2, 1.4,
                  1.2, 1.3, 1.4, 1.5,
                  1.6, 1.6, 1.5, 1.8,
                  1.8, 1.9, 2.0, 2.1])
```

```
Tx = h*np.array([[0.0, 0.5], [0.0, 1.5],
                 [0.0, 2.5], [0.0, 3.5],
                 [0.5, 0.0], [1.5, 0.0],
                 [2.5, 0.0], [3.5, 0.0],
                 [0.0, 3.0], [0.0, 2.0],
                 [0.0, 1.0], [0.0, 0.0],
                 [1.0, 0.0], [2.0, 0.0],
                 [3.0, 0.0], [0.0, 4.0]])
```

```
Rx = h*np.array([[4.0, 0.5], [4.0, 1.5],
                 [4.0, 2.5], [4.0, 3.5],
                 [0.5, 4.0], [1.5, 4.0],
                 [2.5, 4.0], [3.5, 4.0],
                 [1.0, 4.0], [2.0, 4.0],
                 [3.0, 4.0], [4.0, 4.0],
                 [4.0, 3.0], [4.0, 2.0],
                 [4.0, 1.0], [4.0, 0.0]])
```

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

## ● Construction de la matrice $G$ .

```
G = np.zeros((16, nx*nz))

G[0, :4] = h
G[1, 1:4] = h
G[2, 2:4] = h
G[3, 3:4] = h
G[4, :4] = h
G[5, 4:8] = h
G[6, 8:12] = h
G[7, 12:16] = h
G[8, 3] = np.sqrt(2*h*h)
G[9, 2:8:5] = np.sqrt(2*h*h)
G[10, 1:12:5] = np.sqrt(2*h*h)
G[11, :5] = np.sqrt(2*h*h)
G[12, 4:5] = np.sqrt(2*h*h)
G[13, 8:5] = np.sqrt(2*h*h)
G[14, 12] = np.sqrt(2*h*h)
G[15, 3:13:3] = np.sqrt(2*h*h)
```

# Problème part. indéterminé – Exemple

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Générez les données et ajoutez un bruit gaussien avec  $\sigma^2 = 0.05$
- Comparez la solution des moindres-carrés ordinaires avec les moindres-carrés amortis pour
  - $\varepsilon = 10$
  - $\varepsilon = 1$
  - $\varepsilon = 0.1$
  - $\varepsilon = 0.001$
  - $\varepsilon = 10^{-15}$



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Dans plusieurs cas, la longueur  $L = \mathbf{m}^T \mathbf{m}$  n'est pas une mesure appropriée de la simplicité du modèle;
- Par exemple, si on cherche à évaluer les fluctuations par rapport à une moyenne connue
  - il est préférable de minimiser la distance par rapport à cette moyenne  $\langle \mathbf{m} \rangle$ , i.e.

$$L = (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \quad (31)$$

- Dans d'autres cas, on sait que le modèle est continu et varie lentement spatialement
  - on peut alors minimiser
    - l'inclinaison (*steepness*) : dérivée première de  $\mathbf{m}$
    - la rugosité (*roughness*) : dérivée seconde de  $\mathbf{m}$

# Types d'info *a priori* – Pondération

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- L'inclinaison ou la rugosité peuvent être calculées à partir d'une matrice **D** telle que (pour l'inclinaison)

$$\mathbf{D}\mathbf{m} = \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{M-1} \end{bmatrix} \quad (32)$$

- Pour la rugosité, les lignes contiennent  $(\Delta x)^{-2}[\dots \quad 1 \quad -2 \quad 1 \quad \dots]$
- Le terme à minimiser est alors

$$L = (\mathbf{D}\mathbf{m})^T(\mathbf{D}\mathbf{m}) = \mathbf{m}^T \mathbf{D}^T \mathbf{D} \mathbf{m} = \mathbf{m}^T \mathbf{W}_m \mathbf{m} \quad (33)$$

- La matrice  $\mathbf{W}_m$  donne un poids différent aux paramètres du modèle.

# Types d'info *a priori* – Pondération

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

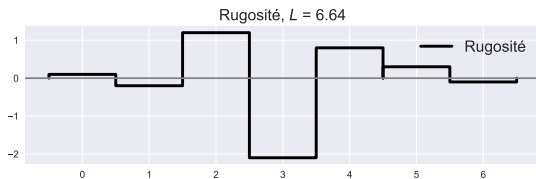
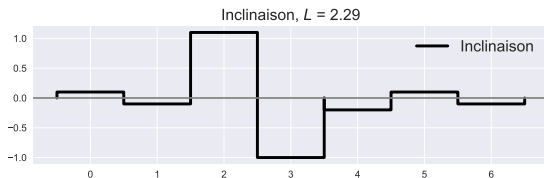
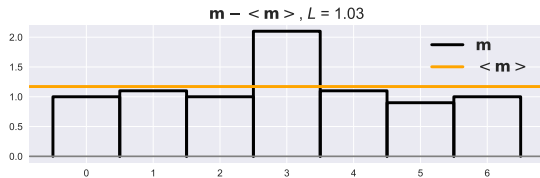
Problème partiellement  
indéterminé

**Pondération**  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives



# Types d'info *a priori* – Pondération

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- La mesure de la simplicité du modèle peut être généralisée à

$$L = (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle)^T \mathbf{W}_m (\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle) \quad (34)$$

- D'une façon similaire, il est possible de pondérer certains terme de l'erreur de prédiction;
  - utile lorsque certaines mesures sont plus précises que d'autres.
- L'erreur de prédiction généralisée s'écrit alors

$$E = \mathbf{e}^T \mathbf{W}_e \mathbf{e}. \quad (35)$$

- $\mathbf{W}_e$  est généralement une matrice diagonale;
  - Par exemple, pour 5 mesures où on sait que la 3<sup>e</sup> est deux fois plus précise, on aura

$$\mathbf{W}_e = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 2 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (36)$$

# Types d'info *a priori* – Pondération

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- La solution des moindres-carrés pondérés, i.e. lorsque  $E = \mathbf{e}^T \mathbf{W}_e \mathbf{e}$ , vaut

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = (\mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{d}. \quad (37)$$

- Lorsque le système est partiellement indéterminé, l'amortissement est inclus et la solution est

$$\mathbf{m}^{\text{est}} = (\mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{W}_m)^{-1} (\mathbf{G}^T \mathbf{W}_e \mathbf{d} + \varepsilon^2 \mathbf{W}_m \langle \mathbf{m} \rangle) \quad (38)$$

- Pour résoudre ce système, on peut le simplifier en posant

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_e^{1/2} \mathbf{G} \\ \varepsilon \mathbf{D} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_e^{1/2} \mathbf{d} \\ \varepsilon \mathbf{D} \langle \mathbf{m} \rangle \end{bmatrix} \quad (39)$$

- Il suffit alors de résoudre  $\mathbf{F} \mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{f}$  par la méthode des moindres-carrés ordinaire :  $\mathbf{m}^{\text{est}} = (\mathbf{F}^T \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{f}$ .

# Types d'information *a priori* – Exercice 1

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Le problème est de retrouver une fonction sinus à partir de points aléatoirement distribués.

```
M = 101
Dz = 1.0
z = Dz*np.arange(M)
zmax = z.max()
mtrue = np.sin(3*np.pi*z/zmax)
```

- Les observations sont :

```
ind = np.array([0,8, 14, 16, 36, 48, 60, 72, 84, 90, M-1])
N = ind.size
```

```
zobs = z[ind]
sigmad = 0.0 # pas de bruit dans les données
dobs = np.sin(3*np.pi*zobs/zmax) + \
        sigmad*np.random.randn(N)
```

- Pour simplifier, on attribue un poids égal à chaque observation, i.e.  $W_e$  est une matrice identité.

# Types d'information *a priori* – Exercice 1

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Nous avons  $M=101$  et  $N=11$ , le système est indéterminé;
- On sait qu'une fonction sinus est lisse, on peut minimiser la rugosité.
- **G** contient simplement des 1 aux indices des points de mesure.

```
i = np.arange(N)
j = ind
s = np.ones(i.shape)
G = sp.coo_matrix((s, (i, j)), shape=(N, M))
```

- La matrice de rugosité **D** (de taille  $M \times M$ ) contient les termes  $(\Delta x)^{-2}[\dots 1 \ -2 \ 1 \ \dots]$  centrés sur le paramètre où la dérivée est évaluée.
  - Aux extrémités, on utilise une dérivée première.
- Construisez **D** et résolvez pour trois valeurs de  $\varepsilon$ , soit 1.0, 0.01, 100.0.

# Types d'information *a priori* – Égalité

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Il arrive parfois qu'on
  - connaisse la valeur du modèle en un point donné ;
  - sache qu'une certaine fonction des paramètres est égale à une constante.
- On peut exprimer ces contraintes sous la forme  $\mathbf{Hm} = \mathbf{h}$ , par exemple :
  - la moyenne des paramètres est égale à  $h_0$  :

$$\mathbf{Hm} = \frac{1}{M} [1 \ 1 \ \dots \ 1] \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{M-1} \end{bmatrix} = [h_0] = \mathbf{h} \quad (40)$$

- Une valeur donnée  $m_k$  est connue :

$$\mathbf{Hm} = [0 \ \dots \ 0 \ 1 \ 0 \ \dots \ 0] \begin{bmatrix} m_0 \\ \vdots \\ m_k \\ \vdots \\ m_{M-1} \end{bmatrix} = [h_k] = \mathbf{h} \quad (41)$$



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération  
Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- La méthode des multiplicateurs de Lagrange permet de trouver la solution.
- On minimise  $E$  avec la contrainte que  $\mathbf{Hm} - \mathbf{h} = 0$  en formant la fonction suivante :

$$\Phi(m) = \sum_{i=0}^{N-1} \left[ \sum_{j=0}^{M-1} G_{ij}m_j - d_i \right]^2 + 2 \sum_{i=0}^{p-1} \lambda_i \left[ \sum_{j=0}^{M-1} H_{ij}m_j - h_i \right] \quad (42)$$

où  $p$  est le nombre de contraintes.

- Les dérivées par rapport aux paramètres,

$$\frac{\partial \Phi(m)}{\partial m_q} = 2 \sum_{i=0}^{M-1} m_i \sum_{j=0}^{N-1} G_{jq}G_{ji} - 2 \sum_{i=0}^{N-1} G_{iq}d_i + 2 \sum_{i=0}^{p-1} \lambda_i H_{iq}, \quad (43)$$

sont égalées à zéro pour trouver le minimum.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Sous forme matricielle, le système d'équation est

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{G}^T \mathbf{G} & \mathbf{H}^T \\ \mathbf{H} & 0 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{m} \\ \lambda \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{G}^T \mathbf{d} \\ \mathbf{h} \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}} \quad (44)$$

- Ce système est habituellement résolu avec un solveur itératif.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- La résolution avec les multiplicateurs de Lagrange se prête mal à la situation où on souhaite appliquer une pondération au modèle;
  - on pourrait par exemple vouloir lisser le modèle en plus d'imposer une contrainte d'égalité.
- Une approche par moindres-carrés amortis est possible, il suffit d'ajouter les termes appropriés :

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_e^{1/2} \mathbf{G} \\ \varepsilon \mathbf{D} \\ \gamma \mathbf{H} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_e^{1/2} \mathbf{d} \\ \varepsilon \mathbf{D} \langle \mathbf{m} \rangle \\ \gamma \mathbf{h} \end{bmatrix} \quad (45)$$

où  $\gamma$  permet d'ajuster la pondération de la contrainte d'égalité.

# Types d'information *a priori* – Exercice 2

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Problème purement  
indéterminé

Problème partiellement  
indéterminé

Pondération

Égalité

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Problème : ajuster une droite devant passer par un point connu ( $z'$ ,  $d'$ ).
- Les paramètres du modèle sont l'ordonnée à l'origine  $m_0$  et la pente  $m_1$  ;
  - et la contrainte est que  $d' = m_0 + m_1 z'$ .
- Les données sont :

```
N = 30
zmin = 0
zmax = 10
z = np.sort(zmin + zmax*np.random.rand(N, 1), axis=0)

# d = a + b*z + bruit
a = 2.0
b = 1.0
sd = 0.5
dobs = a + b * z + sd*np.random.randn(N, 1)

# contraintes, z' & d'
zp = 8
dp = 6
```

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

## Variance des paramètres

# Variance des paramètres estimés

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Les données contiennent invariablement un bruit qui va entraîner une erreur dans l'estimation des paramètres du modèle
- Comment le bruit dans les données se propage-t-il dans les paramètres?
- On peut
  - généraliser les estimateurs linéaires vus précédemment à une forme  $\mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{M}\mathbf{d} + \mathbf{v}$ 
    - $\mathbf{M}$  et  $\mathbf{v}$  sont respectivement une matrice et un vecteur, indépendants de  $\mathbf{d}$
  - quantifier le bruit dans les données par la matrice de covariance  $[\text{cov } \mathbf{d}]$
- On peut alors montrer que

$$[\text{cov } \mathbf{m}] = \mathbf{M}[\text{cov } \mathbf{d}]\mathbf{M}^T \quad (46)$$

# Variance des paramètres estimés

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- On assume souvent que les données sont non corrélées et qu'elles ont une la même variance  $\sigma_d^2$ ;
- La covariance des paramètres pour les moindres-carrés vaut alors

$$[\text{cov } \mathbf{m}] = \left[ (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \right] \sigma_d^2 \mathbf{I} \left[ (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \right]^T = \sigma_d^2 (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1} \quad (47)$$

- Pour l'estimateur de longueur minimum nous avons

$$\begin{aligned} [\text{cov } \mathbf{m}] &= \left[ \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{G}^T)^{-1} \right] \sigma_d^2 \mathbf{I} \left[ \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{G}^T)^{-1} \right]^T \\ &= \sigma_d^2 \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{G}^T)^{-2} \mathbf{G} \end{aligned} \quad (48)$$

- Un problème se pose pour estimer  $\sigma_d^2$  ;
  - On peut se baser sur la résolution des appareils de mesures, e.g. un gravimètre précis à  $\pm 5 \mu\text{Gal}$ , on parle alors de *variance a priori* ;
  - On peut aussi se baser sur la distribution des erreurs de prédiction  $e$  obtenues après inversion (*a posteriori*), avec

$$\sigma_d^2 \approx \frac{1}{N-M} \sum_{i=0}^{N-1} e_i^2. \quad (49)$$

- La variance *a posteriori* tend cependant à être surestimée en raison des imprécisions du modèle.
- Le constat final demeure néanmoins : *les paramètres du modèles sont corrélés et de variance inégale.*
- L'opérateur  $\mathbf{G}$  joue un rôle central dans la propagation des erreurs.



# Variance des paramètres estimés

Régression linéaire

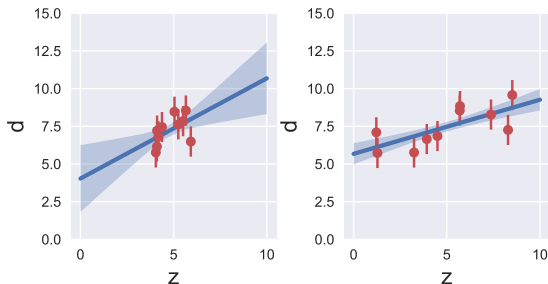
Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

- Exemple de l'influence de  $G$  sur la variance des paramètres :
- la variance des données est la même pour tout les points ;
- l'étalement des coordonnées en  $z$  dicte la variance des paramètres (zone ombragée =  $1\sigma$ ).



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

**Inverse généralisée**

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

# Inverse généralisée

# Problème partiellement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

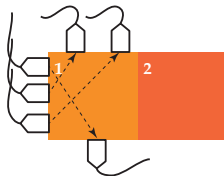
Variance des paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Dans le cas où le problème inverse est en *partie indéterminé*, l'équation  $\mathbf{Gm} = \mathbf{d}$  contient l'information pour seulement une portion des paramètres du modèle;



- On peut concevoir ces combinaisons comme faisant partie d'un sous-espace de l'espace des paramètres, sous-espace que l'on note  $S_p(\mathbf{m})$  et qui correspond à l'espace colonne des paramètres;
- Aucune information n'est contenue concernant le reste de l'espace des paramètres, qui correspond au noyau (*null space* des paramètres noté  $S_0(\mathbf{m})$ );
- La partie de  $\mathbf{m}$  qui se trouve dans le noyau n'est pas "échantillonnée" par  $\mathbf{Gm} = \mathbf{d}$ .

# Problème partiellement indéterminé

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Si une partie du problème est *surdéterminée*, le produit  $\mathbf{Gm}$  ne permet pas de couvrir tout l'espace des données, peu importe le choix de  $\mathbf{m}$ ;
- Au mieux,  $\mathbf{Gm}$  permet de couvrir un sous-espace  $S_p(\mathbf{d})$  de l'espace des données;
- Il existe alors une partie de l'espace des données,  $S_0(\mathbf{d})$  qui ne peut être recouverte, quelque soit le choix des paramètres.

- La **décomposition en valeurs singulières** (SVD) permet
  - d'identifier les espaces colonnes et noyaux des données et des paramètres;
  - de résoudre les problèmes indéterminés et mal conditionnés;
- Pour une matrice  $\mathbf{G}$  de taille  $N \times M$ , la SVD est

$$\mathbf{G} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T \quad (50)$$

où

- $\mathbf{U}$  est une matrice  $N \times N$  orthogonale où les colonnes forment les vecteurs de base de l'espace des données;
- $\mathbf{V}$  est une matrice  $M \times M$  orthogonale où les colonnes forment les vecteurs de base de l'espace des paramètres;
- $\mathbf{S}$  est une matrice  $N \times M$  diagonale contenant les valeurs singulières de  $\mathbf{G}$ .
- Les vecteurs de  $\mathbf{U}$  et  $\mathbf{V}$  sont dans les deux cas orthogonaux et sont choisis de longueur unitaire; il découle que

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{I} \quad \text{et} \quad \mathbf{V}\mathbf{V}^T = \mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{I}$$

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Les valeurs singulières sont habituellement classées en ordre décroissant sur la diagonale de  $\mathbf{S}$ ;
- Certaines valeurs singulières peuvent être égales à zéro, ce qui fait qu'on peut partitionner  $\mathbf{S}$  selon

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_p & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (51)$$

où  $p$  est le nombre de valeurs non nulles.

- Similairement,  $\mathbf{U}$  et  $\mathbf{V}$  peuvent être partitionnées par colonnes, selon  $[\mathbf{U}_p \ \mathbf{U}_0]$  et  $[\mathbf{V}_p \ \mathbf{V}_0]$ , pour ne garder que les colonnes non multipliées par la partie nulle de  $\mathbf{S}$ ;
- On a alors la forme compacte

$$\mathbf{G} = \mathbf{U}_p \mathbf{S}_p \mathbf{V}_p^T \quad (52)$$

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Les colonnes de  $\mathbf{U}_p$  sont dans l'espace colonne des données  $S_p(\mathbf{d})$  (aussi noté  $S_p(\mathbf{G})$ ) et sont linéairement indépendantes.
- Comme il y a  $p$  vecteurs dans la base, le rang de  $\mathbf{G}$  est  $p$ .
- On peut montrer que  $S_0(\mathbf{G}^T) + S_p(\mathbf{G}) = \mathbb{R}^n$ , et que les  $N - p$  colonnes de  $\mathbf{U}_0$  forment la base du noyau de  $\mathbf{G}^T$ .
- On nomme ainsi  $S_0(\mathbf{G}^T)$  le noyau des données.
- Similairement, on nomme  $S_0(\mathbf{G})$  le noyau du modèle.
- Les matrices  $\mathbf{U}_p$  et  $\mathbf{V}_p$  sont normalisées, de telle sorte que

$$\mathbf{U}_p^T \mathbf{U}_p = \mathbf{V}_p^T \mathbf{V}_p = \mathbf{I}$$

où  $\mathbf{I}$  est de taille  $p \times p$ .

- Par contre, comme ces matrices ne couvrent généralement pas l'espace complet des données et des paramètres,  $\mathbf{U}_p \mathbf{U}_p^T$  et  $\mathbf{V}_p \mathbf{V}_p^T$ , ne sont habituellement pas des matrices identités.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- La SVD peut être utilisée pour calculer l'inverse généralisée de  $\mathbf{G}$ , aussi appelée pseudo-inverse de Moore-Penrose :

$$\mathbf{G}^+ = \mathbf{V}_p \mathbf{S}_p^{-1} \mathbf{U}_p^T \quad (53)$$

- La solution est alors

$$\mathbf{m}_+ = \mathbf{G}^+ \mathbf{d} \quad (54)$$

- Une propriété intéressante de (54) est que  $\mathbf{G}^+$  existe toujours, et donc qu'une solution existe toujours.
  - Les valeurs singulières nulles "correspondent" aux colonnes de  $\mathbf{G}$  linéairement dépendantes, la SVD "filtre" pour ne garder que les colonnes indépendantes.



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

On peut montrer que

- Lorsque  $N = M = p$ ,  $\mathbf{G}^+ = \mathbf{G}^{-1}$  et la solution est unique et les paramètres s'ajustent parfaitement aux données.
- Lorsque  $N = p$  et  $p < M$ ,  $\mathbf{G}^+$  est équivalent à la solution de longueur minimum. Pour des raisons de précision numérique, on favorise en pratique l'utilisation de la SVD pour solutionner le système.
- Lorsque  $M = p$  et  $p < N$ ,  $\mathbf{G}^+$  est équivalent à la solution des moindres-carrés.
- Lorsque  $p < N$  et  $p < M$ ,  $\mathbf{G}^+$  est équivalent à la solution de longueur minimum.

# Variance des paramètres

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- On a vu que la covariance des paramètres est

$$[\text{cov } \mathbf{m}] = \sigma_d^2 (\mathbf{G}^T \mathbf{G})^{-1}$$

- Pour l'inverse généralisée on a

$$[\text{cov } \mathbf{m}_+] = \mathbf{G}^+ [\text{cov } \mathbf{d}] (\mathbf{G}^+)^T \quad (55)$$

$$= \sigma_d^2 \mathbf{G}^+ (\mathbf{G}^+)^T \quad (56)$$

$$= \sigma_d^2 \mathbf{V}_p \mathbf{S}_p^{-2} \mathbf{V}_p^T \quad (57)$$

$$= \sigma_d^2 \sum_{i=0}^{p-1} \frac{V_{:,i} V_{:,i}^T}{s_i^2} \quad (58)$$

- Sachant que les valeurs  $s_i$  décroissent, on peut remarquer que les termes successifs de la sommation contribuent davantage à la variance du modèle ;
  - Des valeurs singulières très très faibles peuvent causer une instabilité de la solution.

# Résolution du modèle

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Malheureusement,  $\mathbf{m}_+$  *n'est pas* un estimateur non biaisé de  $\mathbf{m}_{\text{vrai}}$  (sauf si  $p = M$ )
  - Cela est dû au fait que  $\mathbf{m}_{\text{vrai}}$  peut contenir des projections non nulles dans des vecteurs de base de  $\mathbf{V}$  qui ne sont pas utilisés par l'inverse généralisée (portion tronquée).
- On peut quantifier ce biais avec la **matrice de résolution du modèle**;
  - permet de déterminer à quel point  $\mathbf{m}_+$  s'approche de  $\mathbf{m}_{\text{vrai}}$ , en *assumant qu'il n'y a pas d'erreur dans les données*.
- Partant de  $\mathbf{m}_{\text{vrai}}$ , on a que  $\mathbf{d}_{\text{vrai}} = \mathbf{G}\mathbf{m}_{\text{vrai}}$  et donc que

$$\mathbf{m}_+ = \mathbf{G}^+ \mathbf{d}_{\text{vrai}} \quad (59)$$

$$= \mathbf{G}^+ \mathbf{G} \mathbf{m}_{\text{vrai}} \quad (60)$$

$$= \mathbf{R}_m \mathbf{m}_{\text{vrai}} \quad (61)$$

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- $\mathbf{R}_m$  permet donc de quantifier à quel point  $\mathbf{m}_+$  s'approche de  $\mathbf{m}_{\text{vrai}}$  ;
  - si  $\mathbf{R}_m$  est une matrice identité, le modèle vrai peut être retrouvé parfaitement et la résolution est "parfaite".
- En pratique, on examine la diagonale de  $\mathbf{R}_m$  pour voir si les éléments sont proches de 1 ;
  - si c'est le cas, les paramètres correspondants sont bien résolus ;
  - dans le cas inverse, les paramètres sont une moyenne pondérée des paramètres vrais.
- On peut aussi mener un test de résolution avec un modèle impulsional  $\mathbf{m}_i$  (vecteur de 0 avec un seul élément  $i$  égal à 1) ;
  - Le produit de  $\mathbf{R}_m$  avec  $\mathbf{m}_i$  fait ressortir la contribution des colonnes de  $\mathbf{R}_m$  sur le  $i^e$  paramètre.

## Résolution du modèle

## Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

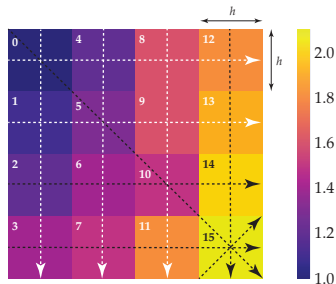
### Variance des paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

## Méthodes itératives

- Examinons la signification de la matrice de résolution avec un exemple en tomographie.
- Le modèle comporte 16 paramètres;
- La taille  $h$  vaut 2;
- 10 mesures ont été effectuées.



# Résolution du modèle

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

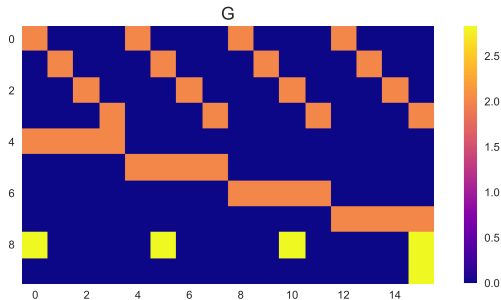
Inverse généralisée

Résolution

Instabilité

Méthodes itératives

- La matrice  $G$  a la forme suivante :



- Le rang de la matrice est 9.

# Résolution du modèle

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

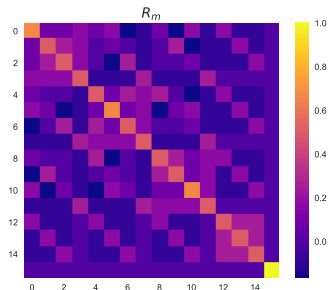
Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- La matrice de résolution contient les éléments les plus élevés sur sa diagonale.
- La résolution est 1 seulement pour le 16<sup>e</sup> paramètre.
- Les autres paramètres contiennent des contributions des cellules voisines.



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

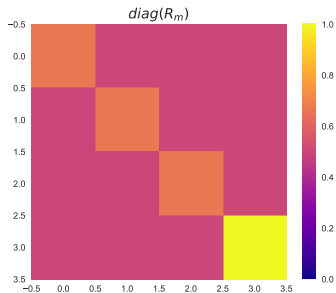
Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

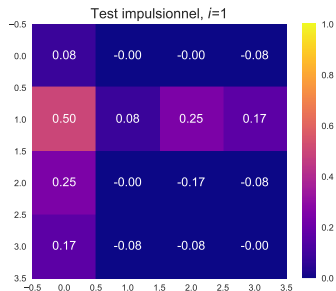
Méthodes itératives

- La résolution est plus élevée aux cellules traversés par le long rai oblique.





- Test impulsif pour  $\mathbf{m}_i = [0100 \dots 0]$
- La 2<sup>e</sup> cellule ne peut être complètement distinguée de ses voisines;
- Les cellules traversés par le long rai oblique contribuent moins.



# Résolution du modèle

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

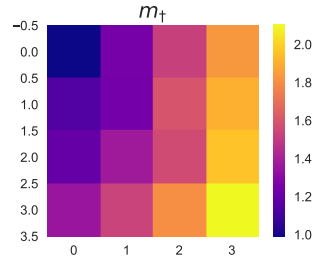
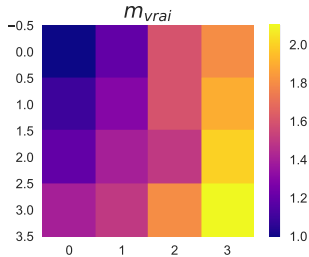
Inverse généralisée

Résolution

Instabilité

Méthodes itératives

- Malgré la résolution imparfaite, le modèle estimé est proche du modèle vrai.



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Idéalement, on voudrait que  $\mathbf{m}_+$  nous permette de retrouver exactement les données observées.
- D'une façon similaire à la résolution du modèle, on peut évaluer individuellement le poids des données observées dans les données prédites par  $\mathbf{m}_+$ .
- Soit  $\mathbf{d}_+$  le vecteur des données produit par  $\mathbf{m}_+$ , i.e.

$$\mathbf{d}_+ = \mathbf{G}\mathbf{m}_+ \quad (62)$$

- Puisque  $\mathbf{m}_+ = \mathbf{G}^+\mathbf{d}$ , on a que

$$\mathbf{d}_+ = \mathbf{G}\mathbf{G}^+\mathbf{d} \quad (63)$$

$$= \mathbf{R}_d\mathbf{d} \quad (64)$$

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Si  $\mathbf{R}_d = \mathbf{I}$ , l'erreur de prédiction est nulle.
- À l'inverse,  $\mathbf{R}_d$  donne une mesure de la capacité de l'estimateur à reproduire les données;
- Si par exemple  $\mathbf{R}_d$  contient une ligne égale à

$$[\dots 0 \ 0 \ 0 \ 0.1 \ 0.8 \ 0.1 \ 0 \ 0 \ 0 \ \dots]$$

où 0.8 apparaît sur le  $i^e$  colonne, alors

$$d_i^{\text{pre}} = \sum_j R_d(i, j) d_j^{\text{obs}} = 0.1 d_{i-1}^{\text{obs}} + 0.8 d_i^{\text{obs}} + 0.1 d_{i+1}^{\text{obs}} \quad (65)$$

# Résolution des données

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

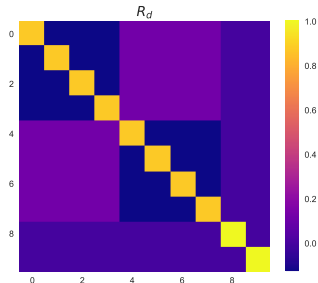
Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Examinons  $R_d$  pour l'exemple précédent
- Les valeurs sur la diagonale sont assez proches de 1, sauf pour les 8<sup>e</sup> et 9<sup>e</sup> données où  $R_d \approx 1$
- Pour les 7 autres données, il y a une composante non nulle des autres termes;
  - les données prédites sont une moyenne pondérée des données observées
- le *notebook* suivant reprend cet exemple avec plus de détails  
[https://github.com/bernard-giroux/geo1302/blob/master/inv\\_svd\\_resolution.ipynb](https://github.com/bernard-giroux/geo1302/blob/master/inv_svd_resolution.ipynb)



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Il est important de rappeler que  $\mathbf{R}_m$  et  $\mathbf{R}_d$  *ne dépendent pas* des données et des modèles, mais qu'elles sont dues *exclusivement* à  $\mathbf{G}$ ;
- Ces matrices sont donc le reflet de
  - la physique du problème;
  - la géométrie d'acquisition des données.
- En pratique, la capacité à retrouver  $\mathbf{m}_{\text{vrai}}$  dépend autant de la résolution que de la propagation du bruit dans les paramètres du modèle.
- $\mathbf{R}_m$  et  $\mathbf{R}_d$  sont des outils très pratiques pour la conception des géométries d'acquisition.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution

Instabilité

Méthodes itératives

- On a mentionné que les valeurs singulières très très faibles peuvent entraîner une instabilité de la solution;
- Cette instabilité peut être quantifiée si on récrit l'estimateur de l'inverse généralisé en fonction des valeurs singulières;
- De fait, on peut montrer que

$$\mathbf{m}_+ = \mathbf{V}_p \mathbf{S}_p^{-1} \mathbf{U}_p^T \mathbf{d} = \sum_{i=0}^{p-1} \frac{\mathbf{U}_{:,i}^T \mathbf{d}}{s_i} \mathbf{V}_{:,i}$$

- En présence de bruit, la projection de  $\mathbf{d}$  dans les directions définies par les colonnes de  $\mathbf{U}$  sera non nulle;
- Une valeur très faible de  $s_i$  au dénominateur, e.g. dans les limites de précision de l'ordinateur, entraîne une valeur très élevée de la contribution du vecteur  $\mathbf{V}_{:,i}$ , au point de dominer la solution;
- Dans le pire des cas, l'inverse généralisé n'est qu'un amplificateur de bruit.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution  
Instabilité

Méthodes itératives

- Une mesure de l'instabilité est le *conditionnement* du système ;
- Partons d'un vecteur de données  $\mathbf{d}$  et de la solution  $\mathbf{m}_+ = \mathbf{G}^+ \mathbf{d}$ , et considérons un  $2^e$  vecteur  $\mathbf{d}'$ , légèrement perturbé, et la solution associée  $\mathbf{m}'_+ = \mathbf{G}^+ \mathbf{d}'$ , alors

$$\mathbf{m}_+ - \mathbf{m}'_+ = \mathbf{G}^+ (\mathbf{d} - \mathbf{d}').$$

- La plus grande différence entre  $\mathbf{m}_+$  et  $\mathbf{m}'_+$  sera lorsque  $\mathbf{d} - \mathbf{d}'$  est projeté dans la direction de  $\mathbf{U}_{\cdot, p-1}$  car cela correspond à la plus petite valeur singulière non nulle.
- Soit

$$\mathbf{d} - \mathbf{d}' = \alpha \mathbf{U}_{\cdot, p-1}$$

alors

$$\|\mathbf{d} - \mathbf{d}'\|_2 = \alpha.$$



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution

Instabilité

Méthodes itératives

- L'influence sur la solution sera

$$\mathbf{m}_+ - \mathbf{m}'_+ = \frac{\alpha}{s_{p-1}} \mathbf{V}_{\cdot, p-1}$$

et

$$\|\mathbf{m}_+ - \mathbf{m}'_+\|_2 = \frac{\alpha}{s_{p-1}}.$$

- On peut ainsi déterminer que

$$\|\mathbf{m}_+ - \mathbf{m}'_+\|_2 \leq \frac{1}{s_{p-1}} \|\mathbf{d} - \mathbf{d}'\|_2$$

puisque  $\alpha$  correspond au cas de la plus grande différence entre  $\mathbf{m}_+$  et  $\mathbf{m}'_+$ .

- Similairement, on peut montrer que le modèle a la plus petite norme lorsque  $\mathbf{d}$  est dans la direction de  $\mathbf{V}_{\cdot, 0}$ , et donc que

$$\|\mathbf{m}_+\|_2 \geq \frac{1}{s_0} \|\mathbf{d}\|_2$$

- En combinant les inégalités, on trouve finalement que

$$\frac{\|\mathbf{m}_+ - \mathbf{m}'_+\|_2}{\|\mathbf{m}_+\|_2} \leq \frac{s_0}{s_{p-1}} \frac{\|\mathbf{d} - \mathbf{d}'\|_2}{\|\mathbf{d}\|_2} \quad (66)$$

- La limite (66) est applicable, peu importe le choix de la valeur de  $p$ ;
- *En réduisant la valeur de  $p$  et éliminant les vecteurs associés aux faibles valeurs singulières, on peut stabiliser la solution.*
- Cette stabilité vient au prix d'une réduction de la résolution.
- On définit le conditionnement de  $\mathbf{G}$  par

$$\text{cond}(\mathbf{G}) = \frac{s_0}{s_{k-1}} \quad (67)$$

où  $k = \min(M, N)$  (si la matrice n'est pas de plein rang,  $\text{cond}(\mathbf{G}) = \infty$ ).

- Un problème possédant un conditionnement bas est dit *bien conditionné*.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Résolution

**Instabilité**

Méthodes itératives

- Un exemple illustrant comment il est possible de traiter un cas instable est présenté dans le *notebook*  
[https://github.com/bernard-giroux/geo1302/blob/master/inv\\_svdt.ipynb](https://github.com/bernard-giroux/geo1302/blob/master/inv_svdt.ipynb)

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

**Méthodes itératives**

Motivation

# Méthodes itératives

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- Pour beaucoup de problèmes inverses en 3D, le nombre de paramètre des modèles à estimer est très élevé, de plusieurs centaines de milliers à quelques millions.
- Des difficultés apparaissent pour stocker les matrices en mémoire et pour solutionner les systèmes avec des méthodes directes (factorisation LU).
- Pour les cas où la matrice  $\mathbf{G}$  est creuse, la famille des *méthodes itératives* offre l'avantage que le produit  $\mathbf{G}^T \mathbf{G}$  n'a pas à être stocké en mémoire.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- L'algorithme de Kaczmarz, développé dans les années 30 pour solutionner des systèmes d'équations linéaires, est particulièrement efficace lorsque  $\mathbf{G}$  est creuse.
- Le point de départ est de considérer que chaque équation  $\mathbf{G}_{i,:}\mathbf{m} = d_i$  est un hyperplan dans  $R^N$ .
- L'algorithme démarre avec une solution  $\mathbf{m}^{(0)}$  (l'exposant désigne l'itération en cours);
- Cette solution est projetée dans l'hyperplan défini par la 1<sup>re</sup> ligne de  $\mathbf{G}$  pour obtenir  $\mathbf{m}^{(1)}$ ;
- Cette solution est ensuite projetée dans l'hyperplan défini par la 2<sup>e</sup> ligne de  $\mathbf{G}$  pour obtenir  $\mathbf{m}^{(2)}$ , et ainsi de suite pour toute les lignes;
- Le processus est répété jusqu'à ce qu'une convergence satisfaisante soit atteinte.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

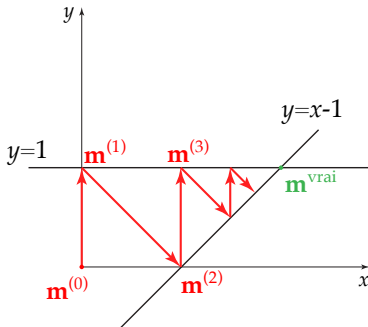
Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- Illustration de l'algorithme de Kaczmarz pour un système à deux équations



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- On sait que le vecteur  $\mathbf{G}_{i,:}^T$  est perpendiculaire à l'hyperplan défini par  $\mathbf{G}_{i,:}\mathbf{m} = d_i$ .
- La projection de  $\mathbf{m}^{(i)}$  vers  $\mathbf{m}^{(i+1)}$  est donc proportionnelle à  $\mathbf{G}_{i+1,:}^T$  i.e.

$$\mathbf{m}^{(i+1)} = \mathbf{m}^{(i)} + \beta \mathbf{G}_{i+1,:}^T \quad (68)$$

- On peut trouver  $\beta$  sachant que  $\mathbf{G}_{i+1,:}\mathbf{m}^{(i+1)} = d_{i+1}$  :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{i+1,:} (\mathbf{m}^{(i)} + \beta \mathbf{G}_{i+1,:}^T) &= d_{i+1} \\ \mathbf{G}_{i+1,:}\mathbf{m}^{(i)} - d_{i+1} &= -\beta \mathbf{G}_{i+1,:}\mathbf{G}_{i+1,:}^T \\ \beta &= -\frac{\mathbf{G}_{i+1,:}\mathbf{m}^{(i)} - d_{i+1}}{\mathbf{G}_{i+1,:}\mathbf{G}_{i+1,:}^T} \end{aligned}$$

- Ce calcul est rapide car il n'implique que des produits de vecteurs.



Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- Si le système  $\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d}$  a une solution unique, l'algorithme de Kaczmarz converge vers cette solution;
- S'il existe plusieurs solutions, l'algorithme converge vers la solution la plus proche de  $\mathbf{m}^{(0)}$  ;
  - si  $\mathbf{m}^{(0)} = \mathbf{0}$ , on obtient la solution de longueur minimum.

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- L'algorithme *algebraic reconstruction technique* (ART) est une variante de celui de Kaczmarz spécifiquement modifié pour la reconstruction tomographique ;
  - Les corrections au modèle ne sont appliquées que si un rai traverse la cellule correspondante ;
  - Initialement, la correction était approximée par une moyenne pour toutes les cellules traversées, ce qui entraîne un certain lissage ;
  - Subséquemment, la correction a été modifié pour tenir compte de la longueur des segments de rai dans chaque cellule traversée.
- Par rapport à Kaczmarz, ART permet de réduire l'utilisation de mémoire et la proportion de multiplications par rapport aux additions (à l'époque (années 70), les multiplications étaient plus coûteuses à calculer).

Régression linéaire

Hypothèses *a priori*

Variance des  
paramètres

Inverse généralisée

Méthodes itératives

Motivation

- Un des problèmes de l'algorithme ART est qu'il tend à produire des images plus bruitées que l'algorithme de Kaczmarz.
- L'algorithme *simultaneous iterative reconstruction technique* (SIRT) est une variation de ART qui donne de meilleures images, au dépend du temps de calcul, légèrement plus long.
- La correction est modifiée pour tenir compte du nombre de segments de rai qui traverse les cellules.
- Un désavantage majeur des algorithmes ART et SIRT est le fait de ne pas pouvoir inclure de contraintes.
- Les algorithmes de Kaczmarz, ART et SIRT ont été supplantés par des méthodes plus efficaces pour des problèmes de grandes dimensions;
  - ils permettent néanmoins d'illustrer le concept de solveur itératif.