INRS
UNIVERSITÉ DE RECHERCHE

Modélisation et inversion en géophysique
5 - Inversion linéaire

Bernard Giroux
(`bernard.giroux@ete.inrs.ca`)

Institut national de la recherche scientifique
Centre Eau Terre Environnement

Version 1.0.0
Hiver 2018

Régression linéaire

Aperçu

- 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^e observation par

$$e_i = d_i^{\text{obs}} - d_i^{\text{pre}}. \tag{1}$$

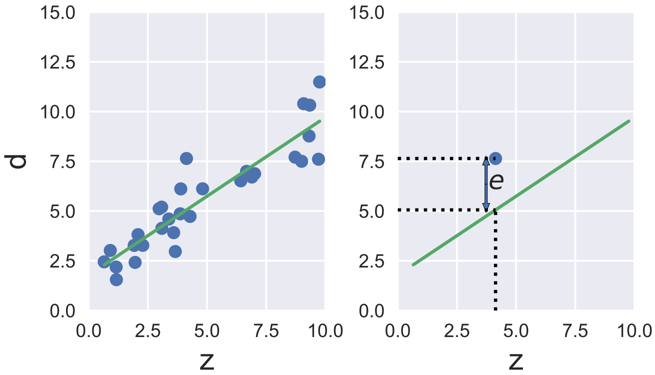
- La méthode des moindres-carrés est l'approche la plus fréquente pour estimer les paramètres du modèle $\mathbf{m}^{\text{est}}$;
  - On cherche dans ce cas les paramètres qui donneront l'erreur E la plus faible, où

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

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

Aperçu

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



Mesure de distance

- 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 :

$$\text{norme } L_1 : \quad \|\mathbf{e}\|_1 = \left[\sum_i |e_i|^1\right] \tag{3}$$

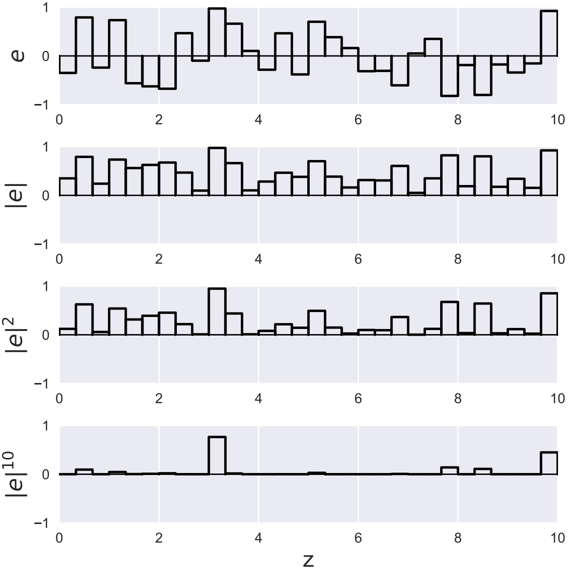
$$\text{norme } L_2 : \quad \|\mathbf{e}\|_2 = \left[\sum_i |e_i|^2\right]^{1/2} \tag{4}$$

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

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

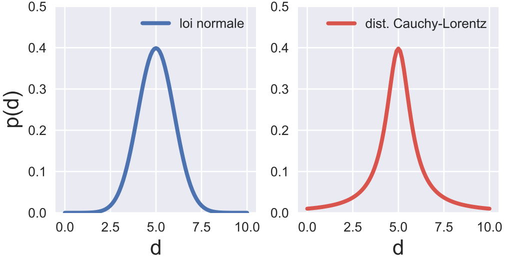
$$\text{norme } L_\infty : \quad \|\mathbf{e}\|_\infty = \max_i |e_i| \tag{6}$$

Mesure de distance



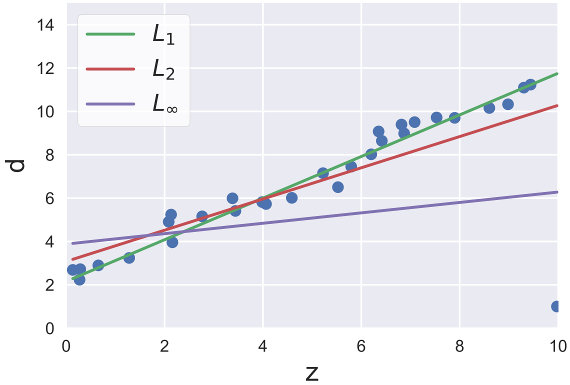
Mesure de distance

- 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

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



Moindres-carrés pour une droite

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

$$d_i = m_0 + m_1 z_i. \tag{7}$$

- 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

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

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

- 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 :

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

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

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

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

Moindres-carrés pour un problème linéaire

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

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

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

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

Moindres-carrés pour un problème linéaire

- Les dérivées sont maintenant calculées
- Pour le 1^e terme, on a

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

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

où

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

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 problème linéaire

- Pour le 2^e terme, on a

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

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

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

- Sous forme matricielle, cela donne

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

Moindres-carrés pour un problème linéaire

- 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 $\left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}$ existe, l'estimateur des paramètres du modèle est

$$\boxed{\mathbf{m}^{\text{est}} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d}} \tag{21}$$

Exercice – ajuster une droite

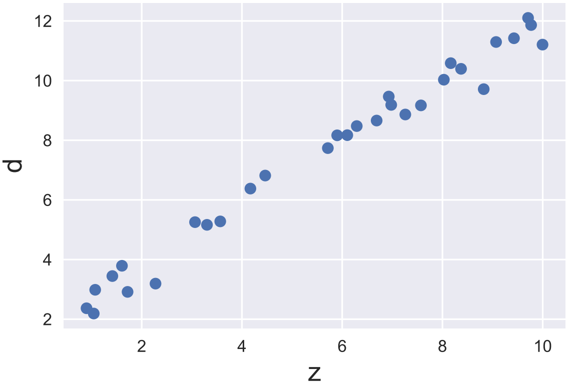
- Les commandes suivantes permettent de générer un ensemble de points plus ou moins alignés le long d'une droite :

```
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



Exercice – ajuster une droite

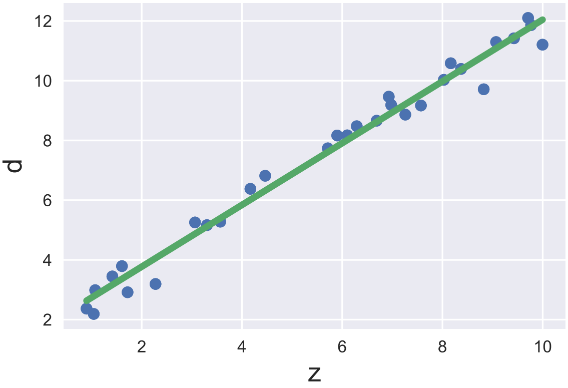
- Étapes à suivre :
  - Construire la matrice $\mathbf{G}$;
  - Calculer $\mathbf{A} = \mathbf{G}^T\mathbf{G}$;
  - Calculer $\mathbf{b} = \mathbf{G}^T\mathbf{d}_{\text{obs}}$;
  - Calculer l'inverse de $\mathbf{A}$;
  - Calculer $\mathbf{m}_{\text{est}} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$.
- Visualisez le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

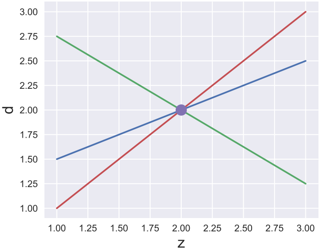
INRS
UNIVERSITÉ DE RECHERCHE

Exercice – ajuster une droite



Existence de la solution moindres-carrés

- 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 $\mathbf{m}^{\text{est}} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d}$, 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.

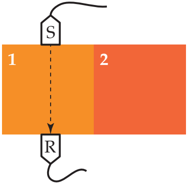


Ajustement d'une droite avec un seul point :

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

Existence de la solution moindres-carrés

- 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 $\left[\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right]^{-1}$ est singulière (non inversible).



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

Hypothèses *a priori*

Hypothèses *a priori*

- 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^3.
- Le choix d'une hypothèse *a priori* n'est pas toujours évident et dépend clairement de l'application.

Problème purement indéterminé

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

$$L = \mathbf{m}^T\mathbf{m} = \sum m_i^2. \tag{22}$$

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

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

où λ_i sont les multiplicateurs de Lagrange.

Problème purement indéterminé

- Le minimum est obtenu en dérivant par rapport à m

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

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

$$2\mathbf{m} = \mathbf{G}^T \boldsymbol{\lambda} \tag{25}$$

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

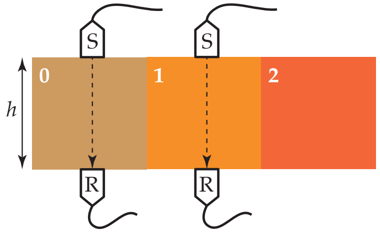
$$\boldsymbol{\lambda} = 2\left[\mathbf{G}\mathbf{G}^T\right]^{-1} \mathbf{d} \tag{26}$$

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

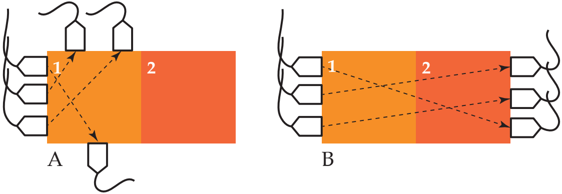
$$\boxed{\mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{G}^T \left[\mathbf{G}\mathbf{G}^T\right]^{-1} \mathbf{d}} \tag{27}$$

Exercice – Prob. purement indéterminé

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



Problème partiellement indéterminé



- 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

- 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) :

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

  où le poids ε^2 détermine l'importance relative de L par rapport à E.
- Si ε est très élevé, l'emphase est mise sur la partie indéterminée
  - se fait au détriment de $E \rightarrow$ le modèle estimé sera loin du modèle vrai.
- Si ε est très faible, l'information *a priori* n'est pas propagée et la partie indéterminée le reste.
- En général, on cherche ε par essai-erreur.

Problème partiellement indéterminé

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

$$\left[\mathbf{G}^T\mathbf{G} + \varepsilon^2\mathbf{I}\right]\mathbf{m}^{\text{est}} = \mathbf{G}^T\mathbf{d} \tag{29}$$

que l'on récrit

$$\boxed{\mathbf{m}^{\text{est}} = \left[\mathbf{G}^T\mathbf{G} + \varepsilon^2\mathbf{I}\right]^{-1}\mathbf{G}^T\mathbf{d}} \tag{30}$$

- $\mathbf{m}^{\text{est}}$ est nommé solution des moindres-carrés *amortis* (*damped least squares*).

Types d'information *a priori* – Pondération

- 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.

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

- 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'information *a priori* – Pondération

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

$$\mathbf{Dm} = \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ & -1 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_0 \\ m_1 \\ \vdots \\ m_{M-1} \end{bmatrix} \tag{32}$$

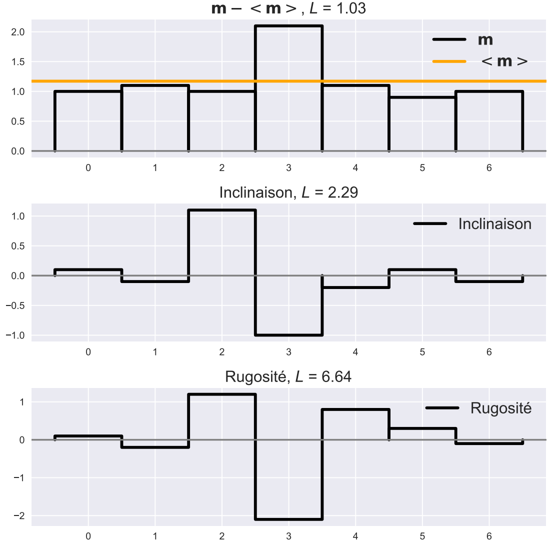
- Pour la rugosité, les lignes contiennent $(\Delta x)^{-2}[\cdots \quad 1 \quad -2 \quad 1 \quad \cdots]$
- Le terme à minimiser est alors

$$L = (\mathbf{Dm})^T(\mathbf{Dm}) = \mathbf{m}^T\mathbf{D}^T\mathbf{Dm} = \mathbf{m}^T\mathbf{W}_\mathrm{m}\mathbf{m} \tag{33}$$

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

INRS UNIVERSITÉ DE RECHERCHE

Types d'information *a priori* – Pondération



Types d'information *a priori* – Pondération

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

$$L = \left(\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle\right)^T \mathbf{W}_\mathrm{m} \left(\mathbf{m} - \langle \mathbf{m} \rangle\right) \tag{34}$$

- 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

$$E = \mathbf{e}^T \mathbf{W}_\mathrm{e} \mathbf{e}. \tag{35}$$

- $\mathbf{W}_\mathrm{e}$ est généralement une matrice diagonale ;
  - Par exemple, pour 5 mesures où on sait que la 3^e est deux fois plus précise, on aura

$$\mathbf{W}_\mathrm{e} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 2 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \tag{36}$$

Types d'information *a priori* – Pondération

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

$$\mathbf{m}^{\mathrm{est}} = \left(\mathbf{G}^T \mathbf{W}_\mathrm{e} \mathbf{G}\right)^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{W}_\mathrm{e} \mathbf{d}. \tag{37}$$

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

$$\boxed{\mathbf{m}^{\mathrm{est}} = \left(\mathbf{G}^T \mathbf{W}_\mathrm{e} \mathbf{G} + \varepsilon^2 \mathbf{W}_\mathrm{m}\right)^{-1} \left(\mathbf{G}^T \mathbf{W}_\mathrm{e} \mathbf{d} + \varepsilon^2 \mathbf{W}_\mathrm{m} \langle \mathbf{m} \rangle\right)} \tag{38}$$

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

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_\mathrm{e}^{1/2} \mathbf{G} \\ \varepsilon \mathbf{D} \end{bmatrix} \qquad \text{et} \qquad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_\mathrm{e}^{1/2} \mathbf{d} \\ \varepsilon \mathbf{D} \langle \mathbf{m} \rangle \end{bmatrix} \tag{39}$$

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

Types d'information *a priori* – Exercice 1

- 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. $\mathbf{W}_e$ est une matrice identité.

Types d'information *a priori* – Exercice 1

- 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 $(\Delta x)^{-2}[\ldots\ 1\ \ -2\,1\ \ \ldots]$ centrés sur le paramètre où la dérivée est évaluée.
  - Aux extrémités, on utilise une dérivée première.
- Construisez **D** et résolvez pour trois valeurs de ε, soit 1.0, 0.01, 100.0.

Types d'information *a priori* – Égalité

- 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 :

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

  - Une valeur donnée m_k est connue :

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

Types d'information *a priori* – Égalité

- 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 :

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

où p est le nombre de contraintes.

- Les dérivées par rapport aux paramètres,

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

sont égalées à zéro pour trouver le minimum.

Types d'information *a priori* – Égalité

- Sous forme matricielle, le système d'équation est

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

- Ce système est habituellement résolu avec un solveur itératif.

Types d'information *a priori* – Égalité

- 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 :

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

où γ permet d'ajuster la pondération de la contrainte d'égalité.

Types d'information *a priori* – Exercice 2

- 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
```

Variance des paramètres

Variance des paramètres estimés

- 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 $\mathbf{m}^{\mathrm{est}} = \mathbf{M}\mathbf{d} + \mathbf{v}$
  - quantifier le bruit dans les données par la matrice de covariance $[\mathrm{cov}\,\mathbf{d}]$
- On peut alors montrer que

$$[\mathrm{cov}\,\mathbf{m}] = \mathbf{M}[\mathrm{cov}\,\mathbf{d}]\mathbf{M}^T \tag{46}$$

Variance des paramètres estimés

- On assume souvent que les données sont non corrélées et qu'elles ont une la même variance σ_d^2 ;
- Les covariance de paramètres pour les moindres-carrés vaut alors

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

- Pour l'estimateur de longueur minimum nous avons

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

Variance des paramètres estimés

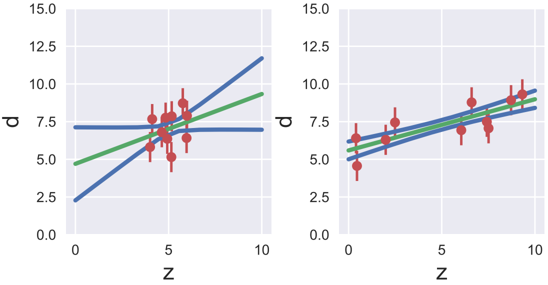
- Un problème se pose pour estimer σ_d^2 ;
  - On peut se baser sur la résolution des appareils de mesures, e.g. un gravimètre précis à $\pm$ 5 μGal, on parle alors de *variance a priori* ;
  - On peut aussi se baser sur la distribution des erreurs de prédiction **e** obtenues après inversion (*a posteriori*), 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 **G** joue un rôle central dans la propagation des erreurs.

Variance des paramètres estimés

- Exemple de l'influence de $\mathbf{G}$ 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 (courbes bleues = 1σ).



Inverse généralisée

Inverse généralisée

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

$$\mathbf{G} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T \tag{50}$$

  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 $\mathbf{G}$.

Inverse généralisée

- 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

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_p & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{51}$$

  où p est le nombre de valeurs non nulles.
- Similairement, $\mathbf{U}$ et $\mathbf{V}$ peuvent être partitionnées par colonnes, selon $\begin{bmatrix}\mathbf{U}_p \; \mathbf{U}_0\end{bmatrix}$ et $\begin{bmatrix}\mathbf{V}_p \; \mathbf{V}_0\end{bmatrix}$, pour ne garder que les colonnes non multipliées par la partie nulle de $\mathbf{S}$;
- On a alors la forme compacte

$$\mathbf{G} = \mathbf{U}_p \mathbf{S}_p \mathbf{V}_p^T \tag{52}$$

Inverse généralisée

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

Inverse généralisée

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

$$\mathbf{G}^\dagger = \mathbf{V}_p \mathbf{S}_p^{-1} \mathbf{U}_p^T \tag{53}$$

- La solution est alors

$$\mathbf{m}_\dagger = \mathbf{G}^\dagger \mathbf{d} \tag{54}$$

- Une propriété intéressante de (54) est que $\mathbf{G}^\dagger$ existe toujours, et donc qu'une solution existe toujours.

Inverse généralisée

On peut montrer que

- Lorsque $N = M = p$, $\mathbf{G}^\dagger = \mathbf{G}^{-1}$ et la solution est unique et les paramètres s'ajustent parfaitement aux données.
- Lorsque $N = p$ et $p < M$, $\mathbf{G}^\dagger$ 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 $p < N$, $\mathbf{G}^\dagger$ est équivalent à la solution des moindres-carrés.
- Lorsque $p < N$ et $p < M$, $\mathbf{G}^\dagger$ est équivalent à la solution de longueur minimum.

Variance des paramètres

- On a vu que la covariance des paramètres est $[\mathrm{cov}\,\mathbf{m}] = \sigma_d^2 \left(\mathbf{G}^T\mathbf{G}\right)^{-1}$
- Pour l'inverse généralisée on a

$$
\begin{aligned}
[\mathrm{cov}\,\mathbf{m}_\dagger] &= \mathbf{G}^\dagger [\mathrm{cov}\,\mathbf{d}] \left(\mathbf{G}^\dagger\right)^T && (55)\\
&= \sigma_d^2 \mathbf{G}^\dagger \left(\mathbf{G}^\dagger\right)^T && (56)\\
&= \sigma_d^2 \mathbf{V}_p \mathbf{S}_p^{-2} \mathbf{V}_p^T && (57)\\
&= \sigma_d^2 \sum_{i=0}^{p-1} \frac{V_{:,i} V_{:,i}^T}{s_i^2} && (58)
\end{aligned}
$$

Résolution du modèle

- Malheureusement, $\mathbf{m}_\dagger$ *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 $\mathbf{m}_\dagger$ 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

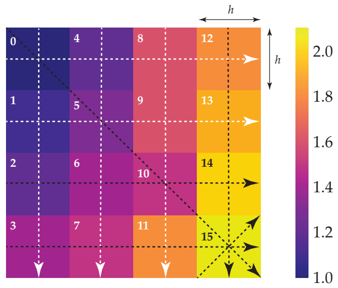
$$\mathbf{m}_\dagger = \mathbf{G}^\dagger \mathbf{d}_{\text{vrai}} \tag{59}$$
$$= \mathbf{G}^\dagger \mathbf{G}\mathbf{m}_{\text{vrai}} \tag{60}$$
$$= \mathbf{R}_{\text{m}}\mathbf{m}_{\text{vrai}} \tag{61}$$

Résolution du modèle

- $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ permet donc de quantifier à quel point $\mathbf{m}_\dagger$ s'approche de $\mathbf{m}_\mathrm{vrai}$;
  - si $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ est une matrice identité, le modèle vrai peut être retrouvé parfaitement et la résolution est "parfaite".
- En pratique, on examine la diagonale de $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ 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 impulsionel $\mathbf{m}_i$ (vecteur de 0 avec un seul élément i égal à 1) ;
  - Le produit de $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ avec $\mathbf{m}_i$ fait ressortir la contribution des colonnes de $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ sur le i^e paramètre.

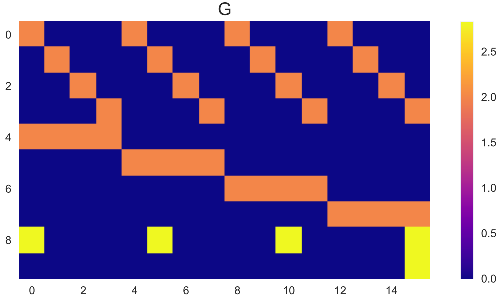
Résolution du modèle

- 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

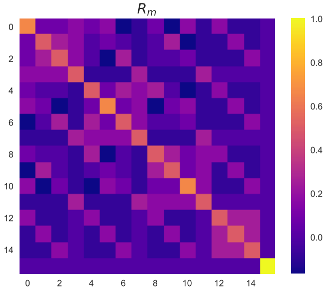
- La matrice $\mathbf{G}$ a la forme suivante :



- Le rang de la matrice est 9.

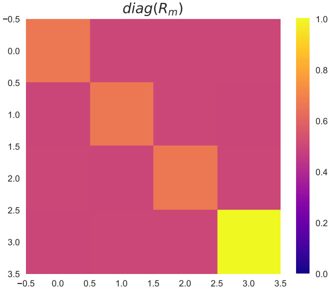
Résolution du modèle

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



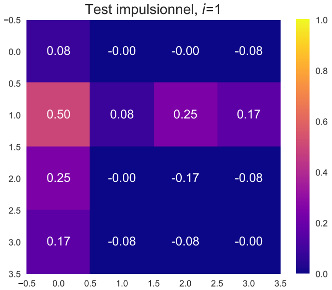
Résolution du modèle

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



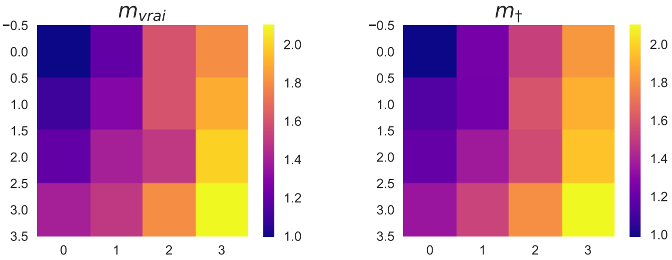
Résolution du modèle

- Test impulsionnel pour $\mathbf{m}_i = [0\,1\,0\,0\,\ldots\,0]$
- La 2^e cellule ne peut être complètement distinguée de ses voisines ;
- Les cellules traversés par le long rai oblique contribuent moins.



Résolution du modèle

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



Résolution des données

- Idéalement, on voudrait que $\mathbf{m}_\dagger$ 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 $\mathbf{m}_\dagger$.
- Soit $\mathbf{d}_\dagger$ le vecteur des données produit par $\mathbf{m}_\dagger$, i.e.

$$\mathbf{d}_\dagger = \mathbf{G}\mathbf{m}_\dagger \tag{62}$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_\dagger &= \mathbf{G}\mathbf{G}^\dagger\mathbf{d} \qquad (63) \\ &= \mathbf{R}_\mathrm{d}\mathbf{d} \qquad (64) \end{aligned}$$

Résolution des données

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

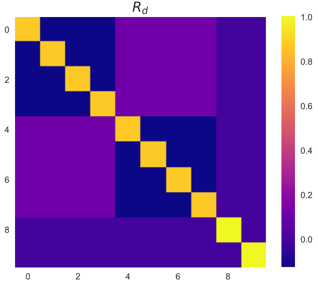
$$[\ldots\ 0\, 0\, 0\, 0.1\, 0.8\, 0.1\, 0\, 0\, 0\ \ldots]$$

où 0.8 apparait sur le i^e colonne, alors

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

Résolution des données

- Examinons $\mathbf{R}_\mathrm{d}$ pour l'exemple précédent
- Les valeurs sur la diagonale sont assez proches de 1, sauf pour les 8^e et 9^e 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



Résolution – Conclusion

- Il est important de rappeler que $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ et $\mathbf{R}_\mathrm{d}$ *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 et de la géométrie d'acquisition des données* ;
- En pratique, la capacité à retrouver $\mathbf{m}_\mathrm{vrai}$ dépend autant de la résolution que de la propagation du bruit dans les paramètes du modèle.
- $\mathbf{R}_\mathrm{m}$ et $\mathbf{R}_\mathrm{d}$ sont des outils très pratiques pour la conception des géométries d'acquisition.