Ajustement d'un modèle par moindres carrés

Sebastien.Lambert@obspm.fr

1 Moindres carrés linéaires

On imagine un signal composé de N échantillons y_i, chacun affecté d'une erreur de mesure σ_i, et un modèle sensé s'ajuster le mieux possible au signal. Le modèle dépend d'un ensemble X de paramètres p_j et de variables x comme les coordonnées de temps ou d'espace et sera noté $f(x; X)$. On recherche ainsi pour quelle valeur de X l'écart quadratique moyen

$$\chi^2 = \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{y_i - f(x_i; X)}{\sigma_i^2} \right)^2, \tag{1}$$

est minimal.

Dans le cas d'un modèle linéaire, la fonction f se formule comme une combinaison linéaire des M paramètres p_j, soit

$$f(x_i; s_j) = \sum_{j=0}^{M} p_j g_j(x_i), \tag{2}$$

où les fonctions g_j ne dépendent plus que de x.

Si on pose

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ ... \\ y_N \end{pmatrix} \quad , \quad A = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & ... & g_M(x_1) \\ ... & ... & ... \\ g_1(x_N) & ... & g_M(x_N) \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$X = \begin{pmatrix} p_1 \\ ... \\ p_M \end{pmatrix} \quad , \quad W = \begin{pmatrix} 1/\sigma_1^2 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 1/\sigma_2^2 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & 1/\sigma_N^2 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

de dimensions respectives N, $N \times M$, M et $N \times N$, l'écart quadratique moyen s'écrit

$$\chi^2 = (AX - Y)^T W (AX - Y). \tag{5}$$

La matrice W est dite matrice des poids. S'il n'y a pas d'erreur formelle associée aux observations, W se réduit à la matrice identité.

Pour minimiser la fonction χ^2, on va chercher pour quelle valeur X_0 de la variable X, la dérivée par rapport à X est nulle, soit

$$2(A^T W A) X_0 - 2 A^T W Y = 0, \tag{6}$$

ce qui donne

$$X_0 = (A^T W A)^{-1} A^T W Y. \tag{7}$$

La matrice $A^T W A$ est appelée matrice normale. Elle est de dimension $M \times M$ et est symétrique.

Le produit AX_0 est le modèle ajusté. On appelle résidu $V = Y - AX_0$ la différence entre observation et modèle ajusté. Si le modèle ajusté est représentatif du signal, les résidus doivent être “petits”. En particulier, l'écart-type des résidus doit être plus faible que celui du signal de départ.

Pour avoir une estimation de l'erreur sur les paramètres p_j qui constituent le vecteur X_0, regardons la matrice de variance-covariance de ce vecteur :

$$\begin{aligned} E(X_0 X_0^T) &= (A^T W A)^{-1} A^T W Y ((A^T W A)^{-1} A^T W Y)^T && (8) \\ &= (A^T W A)^{-1} A^T W Y Y^T W A (A^T W A)^{-1}, && (9) \end{aligned}$$

où il est fait usage du fait que W et $A^T W A$ sont symétriques. Or, si les erreurs sur les mesures sont réalistes, c'est à dire si elles reflètent la dispersion du signal autour de sa moyenne, alors $W = (Y Y^T)^{-1}$. On obtient ainsi que

$$X_0 X_0^T = (A^T W A)^{-1}. \tag{10}$$

C'est une matrice $M \times M$ dont les termes diagonaux sont les erreurs formelles sur les paramètres, et où les termes non-diagonaux sont les corrélations entre paramètres. Les erreurs formelles ne sont autre que la propagation des erreurs de mesure dans le schéma statistique des moindres carrés.

L'hypothèse selon laquelle les erreurs sont réalistes n'est quasiment jamais vérifiée, sauf si on “trafique” ces erreurs pour les rendre réalistes. C'est un point très important en analyse des signaux. En métrologie, une observation n'est jamais faite seule. Elle est répétée un grand nombre de fois. A chaque fois, on obtient une représentation de cette observation entâchée d'une erreur de mesure. Si on suppose que le phénomène mesuré n'a pas varié d'une mesure à l'autre, on devrait obtenir à chaque fois la même valeur à la précision près de l'instrument de mesure. La répétabilité des observations (écart-type des mesures) devrait être donc égale à l'erreur de mesure. Dans un tel cas, l'erreur de mesure est réaliste. Or, on a souvent affaire à des signaux où la répétabilité est supérieure aux erreurs de mesure (souvent parce que les erreurs de mesure ne sont en fait pas des erreurs de mesure mais des erreurs formelles issues du processus de réduction des données d'observation de plus bas niveau).

2 Moindres carrés non-linéaires

Dans bien des cas, la fonction $f(x; X)$ n'est pas linéaire en p_j. Dans ce cas, on essaie de se ramener à un problème linéaire en p_j en se rapprochant de la bonne valeur de p_j grâce à un apriori $p_{j,\mathrm{ap}}$. Par exemple, la théorie pure fournit souvent un bon apriori tel que $X_0 = X_{\mathrm{ap}} + \delta X$ avec δX petit. Le problème se résume alors à estimer δX.

Pour ce faire, on écrira que

$$f(x; X) = f(x; X_{\mathrm{ap}}) + \frac{\partial f(x, X_{\mathrm{ap}})}{\partial X} \delta X. \tag{11}$$

Le reste de la résolution est identique à la version linéaire.

Toutefois, le modèle est faussé par l'approximation linéaire. On impose une pente $\partial f(x, X_{\mathrm{ap}})/\partial X$ qui est fausse car la valeur de X utilisée n'est pas la vraie valeur. On doit donc s'attendre à ce que le δX estimé soit faux aussi. Il nous rapprochera de la vraie valeur, sans toutefois y arriver. Par contre, on peut toujours recommencer le procédé en remplaçant X_{ap} par la valeur mise à jour $X_{\mathrm{ap}} + \delta X$. En itérant, on converge vers la vraie valeur.

3 Exemple de contrainte

Suppose that one wants to estimate the coordinates of a set of N sources, through observation equations linking sources' coordinates to observed VLBI time delays. T being a column vector containing the delays, and ΔX a column vector containing sources' coordinate offset to a priori values (e.g., the ICRF2 catalog), one has

$$T = A\Delta X. \tag{12}$$

To avoid degeneracy, one must constrain the set of radio sources to be aligned onto an the a priori catalog. This is equivalent to impose the parameters of the transformation between the a priori and the estimated catalog to be zero. The 3-parameter transformation is represented by 3 rotations, and reads, at the first order in small angles for the i-th source,

$$\begin{aligned} \Delta\alpha_i &= A_1 \cos\alpha_i \tan\delta_i + A_2 \sin\alpha_i \tan\delta_i - A_3, && (13) \\ \Delta\delta_i &= -A_1 \sin\alpha_i + A_2 \cos\alpha_i, && (14) \end{aligned}$$

or

$$\Delta X_i = B_i\theta, \quad \theta = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}, \quad B_i = \begin{pmatrix} \cos\alpha_i \tan\delta_i & \sin\alpha_i \tan\delta_i & -1 \\ -\sin\alpha_i & \cos\alpha_i & 0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

An estimate of the Helmert parameters is given by inverting the above system of equations in the least-squares sense:

$$\hat{\theta} = (B^T W B)^{-1} B^T W \Delta X = C\Delta X. \tag{16}$$

where W is the weight (covariance) matrix and ΔX a column vector of dimension $2N$. The matrix B is of dimension $2N \times 3$.

Constraining the system is equivalent to assuming $\hat{\theta} = O$, where O is a column vector of length 3 containing zeros, thus giving a relationship between the sources' coordinates. The matrix C is of dimension $3 \times 2N$. Compiling (12) and (16), one gets the full system of constrained observation equations that the VLBI analysis software must solve. It can basically be seen as the sum of the unconstrained system increased by a smaller system traducing the constraint:

$$\begin{pmatrix} T \\ O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} \Delta X. \tag{17}$$

One usually gives the constraint a weight w different than 1 expressed by a reciprocal $\sigma = 1/\sqrt{w}$. This weight is uniformly applied to all constrained parameters. Finally, the inversion of this system gives:

$$\Delta\hat{X} = \left(\begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} A \\ C \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} T \\ O \end{pmatrix} = \left(A^T A + wC^T C\right)^{-1} A^T T. \tag{18}$$

The application of the constraints is therefore equivalent to creating a new normal matrix made of the sum of the normal matrix of the unconstrained problem $A^T A$, and the matrix of same dimension relevant to the constraint $wC^T C$.