TP2 – Droites de régression

Exercice 1 : estimation de D_{YX} par le maximum de vraisemblance

Si n points $P_i = (x_i, y_i)$ du plan se situent au voisinage d'une droite d'*équation paramétrique* $y = ax + b$, il est légitime de modéliser les résidus $r_{(a,b)}(P_i) = y_i - a\,x_i - b$ par une loi normale centrée d'écart-type σ :

$$f_{(\sigma,a,b)}(P_i) = \frac{1}{\sigma\,\sqrt{2\pi}}\,\exp\left\{-\frac{r_{(a,b)}(P_i)^2}{2\,\sigma^2}\right\} \tag{1}$$

La *droite de régression de Y en X* d'un tel nuage de points, notée D_{YX}, est la droite d'équation paramétrique $y = a^* x + b^*$, où a^* et b^* sont les valeurs des paramètres a et b qui maximisent la log-vraisemblance :

$$(\sigma^*, a^*, b^*) = \underset{(\sigma,a,b)\in\,\mathbb{R}^+\times\mathbb{R}^2}{\arg\max}\left\{\ln\prod_{i=1}^{n} f_{(\sigma,a,b)}(P_i)\right\} = \underset{(\sigma,a,b)\in\,\mathbb{R}^+\times\mathbb{R}^2}{\arg\min}\sum_{i=1}^{n}\left\{\ln\sigma + \frac{r_{(a,b)}(P_i)^2}{2\,\sigma^2}\right\} \tag{2}$$

Si l'on suppose l'écart-type du bruit σ fixé, alors le problème se simplifie :

$$(a^*, b^*) = \underset{(a,b)\in\,\mathbb{R}^2}{\arg\min}\sum_{i=1}^{n} r_{(a,b)}(P_i)^2 = \underset{(a,b)\in\,\mathbb{R}^2}{\arg\min}\sum_{i=1}^{n}(y_i - a\,x_i - b)^2 \tag{3}$$

La résolution de (3) par tirages aléatoires n'est pas aussi simple qu'il y paraît, car : d'une part, les inconnues a et b ne sont pas bornées ; d'autre part, a ne suit pas une loi uniforme. Néanmoins, il est facile de montrer que D_{YX} contient le centre de gravité G. On peut donc calculer les coordonnées (x_G, y_G) de G, puis centrer les données. L'équation de D_{YX} devenant $y' = a^* x'$ après changement d'origine, le problème se simplifie encore :

$$a^* = \underset{a\in\,\mathbb{R}}{\arg\min}\sum_{i=1}^{n}(y'_i - a\,x'_i)^2 = \tan\left\{\underset{\psi\in\,]-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}[}{\arg\min}\sum_{i=1}^{n}(y'_i - \tan\psi\,x'_i)^2\right\} \tag{4}$$

Dans (4), la deuxième égalité vient de ce que le paramètre a d'une droite est égal à la tangente de son angle polaire ψ. La résolution de (4) peut être effectuée par tirages aléatoires de ψ selon une loi uniforme sur $]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$.

Écrivez la fonction `estimation_1`, appelée par le script `exercice_1`, permettant de résoudre le problème (4).

Exercice 2 : estimation de D_{YX} par résolution d'un système linéaire

Le critère à minimiser dans (2) s'écrit $\mathcal{F}(\sigma, a, b) = n\,\ln\sigma + \frac{1}{2\,\sigma^2}\sum_{i=1}^{n} r_{(a,b)}(P_i)^2$. Le problème (2) peut donc également être considéré comme un problème d'optimisation différentiable. En notant $\mathcal{G}(a, b) = \sum_{i=1}^{n} r_{(a,b)}(P_i)^2$:

$$\nabla\mathcal{F}(\sigma, a, b) = 0 \quad\Longleftrightarrow\quad \left\{\begin{array}{l}\nabla_\sigma\mathcal{F}(\sigma, a, b) = 0\\ \nabla_{a,b}\mathcal{F}(\sigma, a, b) = 0\end{array}\right. \quad\Longleftrightarrow\quad \left\{\begin{array}{l}\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} r_{(a,b)}(P_i)^2\\ \nabla\mathcal{G}(a, b) = 0\end{array}\right. \tag{5}$$

La première de ces équations était prévisible, puisque c'est la définition même de la variance. Quant à la deuxième équation, elle correspond à l'optimalité du critère à minimiser dans (3). Or, ce critère s'écrit aussi :

$$\mathcal{G}(a, b) = \|AX - B\|^2\,,\ \text{où } A = \begin{bmatrix} x_1 & \cdots & x_n\\ 1 & \cdots & 1\end{bmatrix}^\top,\ X = \begin{bmatrix} a & b\end{bmatrix}^\top \text{ et } B = \begin{bmatrix} y_1 & \cdots & y_n\end{bmatrix}^\top \tag{6}$$

Minimiser $\mathcal{G}(a, b)$ revient donc à chercher une solution approchée du système linéaire $AX = B$, au sens des moindres carrés. Le problème se résout en écrivant les *équations normales* $A^\top AX = A^\top B$, dont la solution s'écrit $X^* = (A^\top A)^{-1}A^\top B = A^+ B$, où $A^+ = (A^\top A)^{-1}A^\top$ est la *matrice pseudo-inverse* de A.

Écrivez la fonction `estimation_2`, appelée par le script `exercice_2`, permettant de comparer cette méthode d'estimation de D_{YX} avec celle de l'exercice 1. Observez ce qui se passe lorsque la droite réelle est quasi-verticale. Faites différents tests en faisant varier soit le nombre de données n, soit le paramètre n_{tests}.

Exercice 3 : estimation de $D_\perp$ par le maximum de vraisemblance

Une droite D du plan peut également être définie par son *équation cartésienne normalisée* $x\cos\theta + y\sin\theta = \rho$, où (ρ, θ) sont les coordonnées polaires de la projection orthogonale sur D de l'origine O du repère. Si l'on note (x_Q, y_Q) les coordonnées cartésiennes de ce point, appelé Q, alors :

- La distance à l'origine de Q vaut $\rho = \sqrt{x_Q^2 + y_Q^2} \in \mathbb{R}^+$;
- L'angle polaire $\theta \in \,]-\pi, \pi]$ de Q se calcule, en Matlab, à l'aide de l'expression $\text{atan2}(y_Q, x_Q)$.

Dans le cas où la droite D passe par l'origine O, l'angle polaire θ de $Q = O$ n'est pas défini. L'équation cartésienne normalisée de D s'écrit alors $x\cos\theta + y\sin\theta = 0$, où θ est l'angle polaire d'un des vecteurs orthogonaux à D. Or, cet angle est défini à π près. Il est donc notable que dans l'équation cartésienne normalisée $x\cos\theta + y\sin\theta = \rho$ d'une droite D du plan, l'angle polaire θ est défini de manière unique lorsque D ne passe pas par l'origine O, mais que cet angle est seulement défini à π près lorsque D contient O.

Il semble légitime de modéliser les résidus $r_{(\theta,\rho)}(P_i) = x_i\cos\theta + y_i\sin\theta - \rho$ par une loi normale centrée :

$$f_{(\sigma,\theta,\rho)}(P_i) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{r_{(\theta,\rho)}(P_i)^2}{2\,\sigma^2}\right\} \tag{7}$$

La *droite de régression en distance orthogonale* du nuage de points, notée $D_\perp$, est la droite d'équation $x\cos\theta^* + y\sin\theta^* = \rho^*$, où θ^* et ρ^* sont les valeurs des paramètres θ et ρ qui maximisent la log-vraisemblance :

$$(\sigma^*, \theta^*, \rho^*) = \underset{(\sigma,\theta,\rho)\in\mathbb{R}^+\times]0,\pi]\times\mathbb{R}}{\arg\max} \left\{\ln \prod_{i=1}^n f_{(\sigma,\theta,\rho)}(P_i)\right\} = \underset{(\sigma,\theta,\rho)\in\mathbb{R}^+\times]0,\pi]\times\mathbb{R}}{\arg\min} \sum_{i=1}^n \left\{\ln\sigma + \frac{r_{(\theta,\rho)}(P_i)^2}{2\,\sigma^2}\right\} \tag{8}$$

En supposant σ fixé, et sachant que la droite de régression $D_\perp$ contient elle aussi le centre de gravité G, la résolution du problème (8) est en tout point analogue à celle du problème (2). Par analogie avec (4) :

$$\theta^* = \underset{\theta\in\,]0,\pi]}{\arg\min} \sum_{i=1}^n (x_i'\cos\theta + y_i'\sin\theta)^2 \tag{9}$$

Écrivez la fonction `estimation_3`, appelée par `exercice_3`, permettant de résoudre le problème (9).

Exercice 4 : estimation de $D_\perp$ par résolution d'un système linéaire

Le critère $\mathcal{I}(\theta) = \sum_{i=1}^n (x_i'\cos\theta + y_i'\sin\theta)^2$ à minimiser dans (9) s'appelle l'*inertie*. Il s'écrit également :

$$\mathcal{I}(\theta) = \|CY\|^2 \quad \text{, où } C = \begin{bmatrix} x_1' & \cdots & x_n' \\ y_1' & \cdots & y_n' \end{bmatrix}^\top \text{ et } Y = \begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\end{bmatrix}^\top \tag{10}$$

Or, la solution approchée du système linéaire $CY = O$, au sens des moindres carrés ordinaires, vaut $C^+O = O$. Pour éviter cette solution, on impose la contrainte $\|Y\| = 1$. Ce nouveau problème se résout en introduisant le *lagrangien* $\mathcal{L}(Y, \lambda) = \|CY\|^2 + \lambda\,(1 - \|Y\|^2)$, où λ constitue un *multiplicateur de Lagrange*. La condition d'optimalité de $\mathcal{L}$ s'écrit :

$$\nabla\mathcal{L}(Y,\lambda) = 0 \iff \begin{cases} \nabla_Y\mathcal{L}(Y,\lambda) = 0 \\ \nabla_\lambda\mathcal{L}(Y,\lambda) = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} C^\top CY = \lambda Y \\ \|Y\| = 1 \end{cases} \tag{11}$$

Sachant que $C^\top C$ est symétrique réelle, cette matrice admet une base orthonormée de vecteurs propres. De plus, comme $C^\top C$ est *semi-définie positive*, ses valeurs propres sont positives ou nulles. Le minimiseur de $\mathcal{I}(\theta)$ de norme 1, noté Y^*, est donc un des deux vecteurs propres associés à la plus petite valeur propre de $C^\top C$. En effet, pour un vecteur propre Y_p de norme 1, associé à la valeur propre λ_p : $\|CY_p\|^2 = Y_p^\top C^\top CY_p = \lambda_p Y_p^\top Y_p = \lambda_p$.

Écrivez la fonction `estimation_4`, appelée par `exercice_4`, permettant de comparer cette méthode d'estimation de $D_\perp$ à celle de l'exercice 3. Observez l'évolution des résultats en fonction de n et de n_{tests}.