Méthodes numériques – TD3

Moindres carrés pondérés

Le but de cette séance est d'aller plus loin dans la compréhension de la résolution de systèmes sur-contraints en introduisant une pondération non uniforme des contraintes.

1 Analyse de l'approximation polynomiale gobale

Au TD précédent (éventuellement testez avec la solution donnée), nous avons pu constater qu'approcher les données des fichiers *data* et *data4* par une unique fonction polynomiale de donnait pas de résultats satisfaisants :

- Le résultat dépend grandement du choix du degré, est il est très difficile de choisir à priori le *bon* degré.
  - Un polynôme de degré trop faible produira une lissage excessif et/ou un résultat très éloigné de la forme générale des données.
  - Au contraire, un polynôme de degré trop important conduit à un problème numériquement instable (condition number très élévé) et/ou à des problèmes d'*overfitting* (comportement instable entre les données).
- Pour le fichier *data4* aucun degré ne conduit à un résultat exploitable, et le résidu oscille avec l'augmentation du degré.

→ **les approximations polynomiales globales sont donc limitées à certains cas très précis où l'on sais par avance que nos données « vivent » sur un polynôme d'un faible degré connu.**

2 Moindre carrées pondérés et approximation locale

Dans ce TD nous allons nous intéresser au fichier *data4*, mais plutôt que de chercher à le reproduire **globalement** par un unique polynôme, nous allons plus simplement chercher à approcher **localement** les données autour d'un point d'intérêt, par exemple le point $\bar{x}=5$. Nous allons ensuite associer à chacune des mesures (x_j, f_j) un poids $w_j \in [0,1]$ décroissant en fonction de la distance de la mesure *i* au point $\bar{x}$, par exemple :

$$w_j = \theta(|p_j - \hat{x}|) \quad \text{avec} \quad \theta(d) = \begin{cases} (1-(d/h)^2)^4 & si\, d<h \\ 0 & sinon \end{cases} ,$$

où *h* définit le support de la fonction de poids. Le problème devient une minimisation au sens des **moindres carrés pondérés**, c'est à dire trouver les coefficients du polynôme $P_D(x) = \sum_{i=0}^{D} \alpha_i x^i$ minimisant : $\sum_i w_i |P_D(x_j - \bar{x}) - f_j|^2$. Remarquez que dans cette expression nous avons *centré* les données autour du point $\bar{x}$, ce n'est pas indispensable, mais cela améliore la stabilité numérique, et simplifiera la suite.

1. Déduire le système d'équations linéaires à former et résoudre pour trouver la valeur des inconnues qui minimise notre énergie. Pour simplifier les écritures, définissez $\bar{x}_j = x_j - \bar{x}$.
2. Implémentez cette solution (vous pouvez reprendre la fonction de fit polynomiale du TP précédent et l'adapter pour prendre en compte les pondérations).
3. Testez avec un polynôme de faible degré (de 2 à 4), et différente valeur pour *h*.
   1. Comme précédemment tracez les données et le résultat du fit sur la même figure, vous ajouterez en plus le tracé de la fonction de poids. Pour le fit, n'afficher que la portion pour laquelle $w_j > \epsilon$ (ex., $\epsilon = 0.1$).
   2. Que ce passe t'il si *h* est trop petit ? Pourquoi ?
   3. Sachant que les points x_j sont uniformément répartis entre 0 et 10, quelle doit être la valeur minimale de *h* pour que le problème soit bien posé ?

3 Moving Least Squares

L'approximation obtenue à l'exercice précédent n'est valable que dans un voisinage très proche du point $\bar{x}$, alors que nous aimerions une approximation lisse et continue $f:\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{R}$ sur l'ensemble du domaine de définition de nos mesures. Soit $P_{\bar{x}}$ le polynôme obtenu précédemment, alors on peut remarquer que $P_{\bar{x}}(0)$ est une bonne estimation de $f(\bar{x})$, ce qui nous permet de définir une fonction continue : $f(x)=P_x(0)$ dont chaque évaluation requière la résolution d'un système d'équations au sens des moindres carrés pondérés. Cette technique est appelée *Moving Least-Squares*.

1. Mettre en œuvre cette approche en évaluant *f* pour un grand nombre de points *x* entre 0 et 10, et tracer la reconstruction ainsi obtenue.
2. Faire varier *h* progressivement et en déduire le rôle de *h* .
3. Testez avec des degrés très faibles, en particulier remarquez que même avec D=0 on obtient une reconstruction exploitable (bien que moins précise qu'avec D=2 ou 4).
4. Comparez D=1 et D=0 avec *h=0.2* sur les données « data ». Expliquez l'effet observé sur les bords.