Dernière Partie - Extensions, applications

lundi 3 avril 2023
16:54

Les moindres carrés totaux ou TLS (Total Least squares)

Dans le PB de moindres carrés classiques, l'hypothèse qui est implicitement faite c'est que les erreurs sont rejetées uniquement au niveau du second membre b

Le modèle linéaire étant $Ax = b + r$ avec r le résidu

$$\min \|r\|_2^2$$
$$r / \; b + r = Ax \in \operatorname{Im} A$$

Dans certains cas on peut avoir intérêt à considérer que A et b sont entâchés d'erreurs, avec une certaine distribution.

(L'hypothèse de base c'est que ces erreurs sont statistiquement indépendantes d'une ligne à l'autre, et possèdent une distribution uniforme de moyenne nulle et de variance identique)

Cela nous conduit à introduire / considérer le PB aux moindres carrés totaux suivant :

$$(TLS) \begin{cases} \min \|(E, r)\|_F^2 \\ (E, r) \text{ t.q. } (A+E)x = b + r \end{cases}$$

Dans ce qui suit, on ne va traiter que le cas où $\operatorname{rang}(A) = n$ est maximal (avec A $m \times n$, $m \geq n$), et $b \notin \operatorname{Im}(A)$

Rque sur le cas où $\operatorname{rang}(A) < n$, qui peut être difficile

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \notin \operatorname{Im}(A)$$

Soit $\varepsilon \neq 0$ qque - $E_\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow b \in \operatorname{Im}(A + E_\varepsilon)$$

$(E_\varepsilon, r = 0)$ réalise l'égalité $(A + E_\varepsilon)\begin{pmatrix} 1 \\ 1/\varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

et $\|(E, 0)\|_F^2 = 2\varepsilon^2 \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0$

$\Rightarrow$ Pas de borne inférieure

Résolution du PB de TLS - utilisation de la SVD

On peut reformuler le PB TLS comme

$$\begin{pmatrix} A, b \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E, r \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix} = 0$$

ou encore

$$Cz + Fz = 0 \quad \text{avec} \quad z = \begin{pmatrix} x \\ -1 \end{pmatrix}$$

et $C = [A, b]$, $F = [E, r]$

(de taille $m \times (n+1)$)

On cherche donc une solution (non triviale, ie $z \neq 0$) au problème homogène $(C+F)z = 0$, et de de façon à minimiser $\|F\|_F^2$

Pour que la solution soit non triviale ($z \neq 0$) il faut que $(C+F)$ soit singulière càd que $\text{rang}(C+F) < n+1$

Considérons alors la SVD de $C = [A, b] = U \Sigma V^T$

$$= \sum_{i=1}^{n+1} \sigma_i u_i v_i^T$$

avec $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq \underbrace{\sigma_{n+1} > 0}$

(car $\text{rang}(A) = n$ et $b \notin \text{Im} A$)

On peut construire facilement la solution TLS dans le cas où $\sigma_n > \sigma_{n+1}$

En effet dans ce cas là, d'après ce qu'on a rappelé (Th de Eckart-Young-Mirski) la matrice $\tilde{C}$ de rang plus petit que $n+1$ la plus proche (au sens de la norme de Frobenius) de C, est donnée par

$$\tilde{C} = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T \quad \text{et} \quad F = \tilde{C} - C$$

$$= -\sigma_{n+1} u_{n+1} v_{n+1}^T$$

est de norme minimale égale à

$$\|F\|_F = \sigma_{n+1}$$

La solution z est alors donnée à partir des vecteurs v_j qui sont $\perp$ et normés.

en effet $(C+F) v_{n+1} = 0$ et z peut alors

être obtenu en multipliant v_{n+1} par un scalaire α de façon à rendre égal à -1 la dernière composante de ce vecteur $z = \alpha v_{n+1}$

ceci sera faisable ssi la dernière composante de v_{n+1} est non nulle.

Si la dernière composante de v_{n+1} est nulle alors pas de solution, et le PB est dit dégénéré.

Exemple

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{pmatrix} \qquad AX = B \quad \begin{cases} B = \begin{pmatrix} 32 \\ 23 \\ 33 \\ 31 \end{pmatrix} & X = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ B = \begin{pmatrix} 32.1 \\ 22.9 \\ 33.1 \\ 30.9 \end{pmatrix} & X = \begin{pmatrix} 9,2 \\ -12,6 \\ 4,5 \\ -1,1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

De petites perturbations sur B ont conduit à de fortes variations sur X

$\text{Cond}(A) = 2984,09$

- Résolution du système linéaire $Ax = b$
  svd de A. $A = U \Sigma V^T$ $\quad b = b^* + e \quad b^*$ terme exact

$$x = A^+ b = \sum_{i=1}^{\hat{n}} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i = x^* + \sum_{i=1}^{\hat{n}} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i$$

$\rightsquigarrow$ amplification du bruit pour les petites valeurs singulières (relativement à la plus grande σ_1)

- Dans les problèmes aux moindres carrés $\min_x \|Ax - b\|_2^2$
  les colonnes de A représentent des observations des variables explicatives, qui servent à représenter les variation d'une variable dépendante b
  C'est la variation de b qu'il convient de bien expliquer / représenter / capter à l'aide des variables explicatives (ds le modèle linéaire), et ceci au travers d'une solution approché $\hat{x}$,
  càd que on veut que $\dfrac{\|A\hat{x} - b\|}{\|b\|}$ soit suffisamment petite.

  Si on considère $\hat{x}$, et un nouveau vecteur ligne a_{new}^T de variables explications (issu de nouvelles observation du même phenomène), associées à une nouvelle observation de la variable dépendante b_{new}
  Il serait souhaitable alors que $b_{new} \simeq a_{new}^T \hat{x}$

  Dans ces conditions, il n'est pas necessaire, strictement parlant, ni même souhaitable dans certains cas, que $\hat{x}$ soit la solution qui minimize $\|Ax - b\|_2$, surtout qd A est mal conditionné.

  Pour réduire le mauvais conditionnement du problème, et faire en sorte que la solution soit moins sensible aux perturbations sur les données observées / données en entrée, on peut considérer diverses techniques.

- Soit par la considération d'un modèle de rang réduit
- Soit par des techniques de régularisation.

I) Modèle de rang réduit

On considère que $\hat{x} \in \mathrm{Im}(Z_k)$ sous espace de dim $k \ll n$ engendré par les colonnes de la matrice Z_k (orthonormées ou non)

On pose alors $\hat{x} = Z_k y$ et le PB à résoudre devient

$$\min_y \|AZ_k y - b\|_2^2$$

Dans ce contexte, une des techniques les plus classiques, c'est de faire une SVD tronquée (TSVD)

⚠ pour des problèmes de dimension pas trop grande → coût de la SVD

$$\hat{x}_k = \sum_{i=1}^{k} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

càd que $Z_k = V_k$ (les k 1ères colonnes de V associées aux k plus gdes valeurs singulières de A.

La "régularisation" de la solution $\hat{x}$ est alors contrôlée par le paramètre de troncature k, qui doit être choisi de manière à amoindrir l'influence du bruit, tout en garantissant la capture nominale des variations de b.

- Une autre approche de type "réduction du modèle", plus adaptée aux problèmes de grande taille, c'est d'exploiter les méthodes de type Krylov, telles que CGLS ou LSQR

LSQR, par ex, qui est basé sur le processus de bidiagonalisation de Golub-Kahan-Lanczos, possède de manière inhérente un effet de régularisation. En effet, à chaque itération, la solution calculée $\hat{x}_k$ appartient à un sous-espace de Krylov de dimension réduite, qui croît avec les itérations.

A l'aide du principe Min-Max de Courant-Fischer, il est possible de montrer que les approximations ainsi construites sont mieux conditionnées que le problème initial

En pratique (et en théorie aussi), les 1ères itérations des méthodes de Krylov capturent les composantes de la solution exacte qui sont associées aux plus grandes valeurs singulières de A.

valeurs singulières de A.

II) Régularisation de Tikhonov.

Cette technique, qui donne en pratique des résultats comparables à la TSVD, a l'avantage de pouvoir être très facilement mise en oeuvre efficacement pour les problèmes de grande taille.

Cela revient à considérer le problème aux moindres carrés suivant :

$$\min_x \quad \|Ax - b\|_2^2 + \lambda^2 \|x\|_2^2$$

qui donne une solution régularisée $x^*(\lambda)$ fonction du paramètre de pénalisation λ.

Ce problème est aussi équivalent au problème de moindres carrés pénalisé suivant :

$$\min_x \quad \left\| \begin{pmatrix} A \\ \lambda I_n \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2^2$$

Le terme de pénalité $\lambda^2 \|x\|_2^2$ quadratique empêche que la solution ne devienne trop grande en norme, et atténue ainsi l'effet des petites valeurs singulières / du mauvais conditionnement.

On peut voir cela en exploitant la SVD de A : la solution de Tikhonov devient

$$\boxed{x(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} \underbrace{\left(\frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda^2} \right)}_{\gamma_i} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i} \qquad (\text{exo})$$

où l'on peut voir que les γ_i jouent le rôle de filtres qui atténuent les composantes liées aux $\sigma_i \ll \lambda$

(Pour rappel : la solution x_{LS} s'obtient avec $\gamma_i = 1 \ \forall i$)

- Une propriété importante des diverses techniques de régularisation qu'on vient de voir, c'est que la norme de la solution ainsi que la norme du résidu sont monotones en fonction du paramètre de régularisation :

TSVD	: paramètre de troncature	k	$\nearrow$
LSQR	: nombre d'itérations	k	$\nearrow$
Tikhonov	: pénalité	λ	$\searrow$

$\Rightarrow \|x^*_{reg}\| \nearrow$ et $\|Ax^*_{reg} - b\| \searrow$

III) Techniques pour le choix du paramètre de régularisation

- Si on a une information précise sur la variance du bruit e dans b, il convient d'appliquer le principe de Morozov :

  Le paramètre de régularisation doit être choisi de sorte que la norme du résidu soit égale (ou de l'ordre de) la norme du bruit $\|b - Ax_{reg}\|_2 \simeq \|e\|_2$

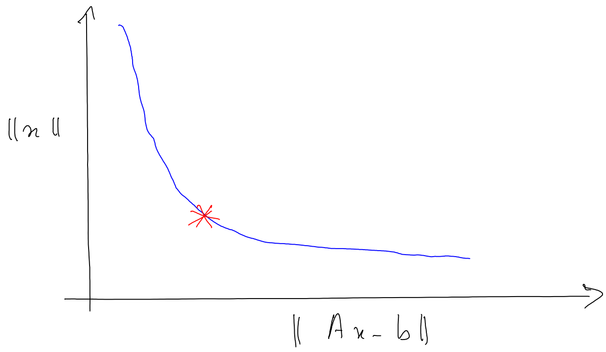
  Il faut faire attention à ne pas sous-estimer la variance du bruit, à cause de la sensibilité de la solution régularisée.

- Si on ne dispose pas d'une estimation fiable de $\|e\|_2$, on peut alors exploiter la "courbe en L" représentant le log de $\|x_{reg}\|_2$ en fonction du log de $\|Ax_{reg} - b\|_2$ pour différentes valeurs du paramètre de régularisation.

  Par ex, dans le cas de la TSVD

  $$\|x_k\|_2^2 = \sum_{i=1}^{k} \left(\frac{u_i^T b}{\sigma_i}\right)^2 \qquad \nearrow (\text{avec } k \nearrow)$$

  $$\|b - Ax_k\|_2^2 = \sum_{i=k+1}^{n} (u_i^T b)^2 \qquad \searrow (\text{avec } k \nearrow)$$



  On fixe alors le paramètre de régularisation en considérant le "coin en bas à gauche" de cette courbe en L.

  Cette technique est mise à mal si la solution est très régulière, dominée essentiellement par quelques composantes dans la SVD