TP Méthode des moindres carrés

<u>mots clefs Scilab</u> : *pinv, svd, rank, rand, qr*

On cherche à résoudre le sytème à n inconnues scalaires et p équations :

$$Bx = c \tag{1}$$

où $B \in M_{pn}(\mathbb{R})$, $x \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}^p$.

En général ce sytème est mal posé. On cherche alors la (une) solution qui minimise l'écart quadratique pour la norme euclidienne :

$$\text{Trouver } x \text{ tel que : } \|Bx - c\|^2 = \inf_{y \in \mathbb{R}^n} \|By - c\|^2 \tag{2}$$

On montre alors qu'une telle solution satisfait les **équations normale** :

$$\text{Trouver } x \text{ tel que : } {}^tBBx = {}^tBc \tag{3}$$

qui devient un problème de résolution d'un sytème linéaire avec une matrice positive.

Si ce sytème admet plusieurs solutions, on cherche alors celle qui est de norme euclidienne minimale. On montre alors qu'elle vérifie les équations normales, et qu'elle est orthogonale au noyeau de ${}^tBB$.

1 Un peu de Maths

On suppose que $p \geq n$: le système est surdéterminé.

1. Montrez que que le problème (2) est équivalent (3).
2. Vérifiez que si B est de rang maximal alors la matrice ${}^tBB$ est définie positive.
   Qu'en déduisez vous alors pour le problème (2) ?
3. Montrez que le problème (2) admet toujours au moins une solution par argument de convexité.
4. Soit Π le projecteur orthogonal de $\mathbb{R}^p$ sur l'image de B. Montrer que toute solution du problème (2) est solution de $Bx = \Pi c$, et réciproquement.
   Donner l'interprétation géometrique de ce résultat.
   En redéduire que le problème (2) admet toujours au moins une solution par argument hilbertien.

2 Exemples aléatoires

Prendre $B = rand(3, 2)$, $c = rand(3, 1)$.

1. Vérifiez que $rang(B)$ est maximal.
2. Expliquer pourquoi le système : $Bx = c$, a une probabilité nulle d'avoir une solution.
3. Calculer $x = B^{-1}c$,$\widetilde{x} = pinv(A) * c$, Bx, $\|Bx - c\|$, et $\|By - c\|$ pour beaucoup de $y = rand(2, 1)$.
   Que peut-on vérifier par ces résultats numériques ?

3 Méthode QR

Prendre $B = rand(3,2)$, $c = rand(3,1)$.

1. Vérifiez que $rang(B)$ est maximal.
2. Mettre en oeuvre la factorisation QR de la matrice B à l'aide de la méthode de Houssholder. (Pour l'algorithme, voir par exemple, Lascaux & Théodor, Vol 1, p.281)
3. Résoudre le problème des moindres carrées à l'aide du pseudo inverse $R^{``-1''}\ {}^tQ$. (Voir par exemple, Lascaux & Théodor).

   Attention : on ne calcule pas de produits de matrices ni d'inverses car cela est beaucoup trop cher. Ainsi, on ne calculera par $R^{``-1''}$ mais on résoudra le système triangulaire $Rx = c$. De même, on obtiendra Q comme produit de matrices de Houssholder sans jamais multiplier ces matrices, mais on multiplira, à chaque étape de la factorisation, le second menbre par leur transposèes : $c = \ {}^tQb$.

4 Exemples de rang non maximal

Construire $B \in M_{3,2}(\mathbb{R})$ de rang 1 et $c = rand(3,1)$.

1. Calculer $x = B\backslash c$. Noter le message d'erreur.
2. Calculer $\widetilde{x} = pinv(A) * c$, Bx, $\|Bx - c\|$, et $\|By - c\|$ pour des $y \neq x$ bien choisis.
   Que peut-on penser de ces résultats numériques ?

5 Droite des moindres carrés

On se donne une série statistiques $(x_i, y_i)_{i=1}^p$. On cherche a et b qui minimise le résidu quadratique moyen $R := \dfrac{1}{p}\displaystyle\sum_{i=1}^{p}(y_i - (ax_i + b))^2$.

1. Interpréter ce problème sous la forme du problème (2) .
2. En déduire, par une orthonormalisation de Gramm-Schmidt les fameuses formules : a est le rapport de la covariance sur la variance de x, et b est tel que la droite d'équation $y = ax + b$ passe par le point moyen du nuage de points associé à la série statistique $(x_i, y_i)_{i=1}^p$.
3. Test numérique : faire plusieurs essais avec, $p = 100$, $x_i = i$, $y_i = i + dP_i$ où $d = 1, 10, 100$ et $X := rand(x)$.
4. Généraliser à la meilleure approximation du nuage par une parabole, une cubique, ...

Références :
Ciarlet : Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation.
Lascaux & Théodor : Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur.