

Feuille 1 : moindres carrés

Exercice 1. Dérivées partielles, gradient, dérivabilité

1. Calculer le gradient de la fonction $f(x_1, x_2) = x_1^2 + 3x_2^2 - x_1 \ln(x_2 + 1)$ définie pour $(x_1, x_2) \in \mathbb{R} \times]-1, +\infty[$.
2. Un exemple de fonction de deux variables qui admet des dérivées partielles en un point mais qui n'est pas dérivable en ce point.

Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ définie par :

$$f(x_1, x_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } x = 0 \\ \frac{x_1 x_2}{x_1^2 + x_2^2} & \text{si } x \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\} \end{cases}$$

- (a) En utilisant la notion de dérivée directionnelle, montrer que les dérivées partielles de f existent en $(0, 0)$ et les déterminer.
- (b) Calculer $\lim_{t \rightarrow 0} f(t, t)$ et montrer que f n'est pas continue en $(0, 0)$.
- (c) Rappeler la notion de dérivabilité pour f en tant que fonction de deux variables. Dédire de ce qui précède que f n'est pas dérivable en $(0, 0)$, bien que toutes ses dérivées partielles existent.

Exercice 2*. Condition nécessaire d'optimalité

Soit f une fonction dérivable sur $\mathbb{R}^n$. On note $f'(x) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ sa dérivée en x (une application linéaire sur $\mathbb{R}^n$). Soit $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ un minimum local de f . On va montrer que nécessairement on a $f'(\bar{x}) = 0$.

1. Quel sens donner au terme $f'(\bar{x})h$ pour $h \in \mathbb{R}^n$? Donner le lien de $f'(x)$ avec le gradient $\nabla f(x) \in \mathbb{R}^n$ de f .
2. Soit $d \in \mathbb{R}^n$ tel que $\|d\| = 1$. A partir de la dérivabilité de f en $\bar{x}$, montrer que, pour un scalaire $\tau \in \mathbb{R}$ suffisamment petit,

$$f'(\bar{x})\tau d + r(\tau d)|\tau| \geq 0$$

où la fonction $r : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est telle que $\lim_{\|h\| \rightarrow 0} r(h) = 0$.

3. En passant à la limite d'une part pour $\tau > 0$, $\tau \rightarrow 0+$ puis pour $\tau < 0$, $\tau \rightarrow 0-$, montrer que

$$f'(\bar{x})d = 0.$$

Conclure.

Exercice 3. Dérivation de la fonction erreur des moindres carrés et équations normales

1. Calculer le gradient de la fonction $f_1 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $f_1(x) = b^\top x = (b | x)$.
2. Même question avec $f_2 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $f_2(x) = (Gx | x)$ où G est une matrice réelle de taille $n \times n$. Simplifier l'expression obtenue lorsque G est symétrique (aide : on pourra calculer chacune des dérivées partielles comme une dérivée directionnelle).
3. On considère maintenant la fonction $E : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$E(x) = \|Ax - b\|_2^2$$

où A est une matrice réelle de taille $m \times n$ avec $m \geq n$.

- (a) Développer (sans regarder le cours) cette fonction pour obtenir une forme quadratique.
- (b) Calculer son gradient.
- (c) Écrire les conditions (nécessaires) d'optimalité vérifiées par le minimum de E (on admet son existence). Le système linéaire obtenu constitue les *équations normales* du problème de moindres carrés $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$.

Exercice 4. Formulations de problèmes de moindres carrés**1. Modèles à une variable d'entrée.**

On dispose de données $(t_i, y_i)_{i \in \llbracket 1, m \rrbracket}$ sensées suivre un modèle $y = f(t)$ donné mais dépendant d'un certain nombre de paramètres inconnus, à déterminer.

Pour chacun des modèles suivants, écrire le problème des moindres carrés correspondant sous la forme standard $\min_x \|Ax - b\|_2^2$ en explicitant la matrice A et le vecteur b .

Ecrire ensuite les équations normales permettant de trouver les valeurs optimales des paramètres.

(a) *Droite de régression linéaire* : on cherche à identifier les paramètres α et β pour le modèle $y = f(t) := \alpha + \beta t$.

(b) On cherche à identifier les paramètres α et β pour le modèle $y = f(t) := \alpha + \beta \exp(-t^2)$.

2. Modèles à plusieurs variables d'entrée.

Même problématique que précédemment mais avec un modèle physique à deux variables d'entrées (notées x et y) et une sortie (notée z) donc de la forme " $z = f(x, y)$ ". On entreprend une série de m mesures $\{(x_i, y_i, z_i), i \in \llbracket 1, m \rrbracket\}$ et on essaie de déterminer un modèle raisonnable $z = f(x, y)$ donnant donc directement z en fonction de x et y .

(a) On utilise $f_1(x, y) = a + bx + cy$ comme premier modèle. On détermine ses trois paramètres a, b et c par moindres carrés. Ecrire ce problème sous la forme standard :

$$\min_{v \in \mathbb{R}^3} \|Mv - z\|_2^2$$

où $v = (a, b, c)^\top$ (il s'agit donc de déterminer la matrice M et le vecteur z).

(b) Même question avec le modèle à 6 paramètres $f_2(x, y) = f_1(x, y) + dx^2 + exy + fy^2$.

Exercice 5. Moindres carrés avec poids

Lorsque les mesures n'ont pas la même précision, il est plus intéressant de minimiser la fonction :

$$E_w(x) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{f(t_i, x) - y_i}{\sigma_i} \right)^2$$

Lorsque le modèle est linéaire en ses paramètres, on a $f(t, x) = \sum_{j=1}^n x_j \varphi_j(t)$.

1. Montrer que $E_w(x) = \|A_w x - b_w\|_2^2$ où $(A_w)_{i,j} = \varphi_j(t_i)/\sigma_i$ et $(b_w)_i = y_i/\sigma_i$.
2. Montrer aussi que $E_w(x) = \|W A x - W b\|_2^2$ où W est la matrice diagonale $\text{diag}(1/\sigma_1, \dots, 1/\sigma_m)$, A et b étant la matrice et le vecteur intervenant dans la fonction des moindres carrés sans pondération i.e. $(A)_{i,j} = \varphi_j(t_i)$ et $b_i = y_i$.

Exercice 6. Modèle exponentiel linéarisable

Un modèle souvent rencontré est le modèle exponentiel décroissant $y = C e^{-t/\tau}$ de paramètres C et τ la constante de temps. Pour identifier ces paramètres on dispose de mesures (t_i, y_i) où $y_i > 0, \forall i$.

1. Ce modèle n'est pas linéaire par rapport au paramètre τ : montrer qu'en passant en log on obtient un modèle linéaire de paramètres $x_1 := \log(C)$ et $x_2 := 1/\tau$.
2. Ecrire alors le problème sous la forme standard $\min_x E(x) = \|Ax - b\|_2^2$ (i.e. donner la matrice A et le vecteur b) puis écrire les équations normales associées.

Exercice 7. Étude des équations normales

Soit A une matrice de taille $m \times n$ avec $m \geq n$.

1. Montrer que $A^\top A$ est une matrice semi-définie positive.
2. Montrer que si $\ker A = \{0\}$ alors tous les vecteurs colonnes A^i de A sont linéairement indépendants i.e. la famille $\mathcal{A} = (A^1, \dots, A^n)$ est libre, de sorte que le rang* de A est maximal i.e. $\text{rang}(A) = n$.

*. Le rang d'une matrice est le nombre de vecteurs colonnes linéairement indépendants.

- On suppose que $\ker A = \{0\}$. Montrer que $A^\top A$ est une matrice définie positive et en déduire qu'elle est inversible. Les équations normales admettent alors une unique solution.

Exercice 8*. *Stricte convexité de la fonction erreur et condition suffisante d'optimalité*

- Montrer que sous l'hypothèse $\ker A = \{0\}$, la fonction erreur $E(x) = \|Ax - b\|_2^2$ est strictement convexe (aide : utiliser le fait que $\ker A = \{0\} \Rightarrow A^\top A$ est définie positive, cf. Ex. 7).
- Démontrer le théorème suivant du cours : si $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est dérivable sur $\mathbb{R}$ et strictement convexe et si $\exists x^*$ tel que $f'(x^*) = 0$ alors x^* est le minimum global strict de f .

Aide : écrire la propriété de convexité de f en utilisant les points x et x^* ($x \neq x^*$) avec un paramètre $\theta \in (0, 1)$. Ecrire la dérivée directionnelle dans la direction $x - x^*$ et passer à la limite en $\theta \rightarrow 0+$. L'unicité s'obtient par contradiction (supposer qu'il existe un deuxième minimum global différent de x^* et en utilisant encore la convexité).

- Méthode alternative.* Une autre méthode (que celle consistant à utiliser la stricte convexité de E) pour montrer que la solution x^* des équations normales est bien le vecteur réalisant le minimum de E , est de montrer directement que $E(x) > E(x^*)$, $\forall x \neq x^*$. Développer $q(x) = E(x) - E(x^*)$ en utilisant le fait que $A^\top A x^* = A^\top b$ et montrer que $q(x) > 0$, $\forall x \neq x^*$, en utilisant la propriété $A^\top A$ définie positive.

Exercice 9. *Résolution des équations normales avec python*

- Dans un fichier `mdc.py` écrire une fonction d'entête

```
def resoud_mdc(A,b):
```

qui, à partir de la forme standard d'un problème de moindres carrés (minimiser la fonction d'erreur $E(x) = \|Ax - b\|_2^2$), c'est-à-dire à partir de la matrice A (de taille $m \times n$) et du vecteur b (de taille $m \times 1$), calcule la solution x^* en résolvant les **équations normales**.

Pour résoudre un système linéaire de la forme $Ax = b$, vous pourrez utiliser la fonction

```
scipy.linalg.solve(A, b, assume_a='sym')
```

avec l'option `assume_a='sym'` si vous savez que la matrice est symétrique.

Rappels. Vous pourrez aussi utiliser :

- l'opérateur `@` pour la multiplication matricielle (avec une matrice ou un vecteur) ou la fonction `numpy.dot(A1,A2)`
- la méthode `A.transpose()` ou plus court l'attribut `A.T` pour transposer une matrice (dans les deux cas l'argument n'est pas modifié et la matrice transposée est retournée).

- Tester votre fonction en calculant la solution x^* au sens des moindres carrés de l'équation $Ax = b$ avec

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -1 & 2 \\ 0 & 3 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -4 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Calculer l'erreur $\|Ax^* - b\|_2$ (vous pourrez utiliser la fonction `scipy.linalg.norm(x)` pour calculer la norme d'un vecteur x).

Exercice 10. *La mousse de bière*

Un chercheur bavarois, Arnd Leike, a montré que lorsqu'on sert un verre de bière, juste après la formation du nuage de mousse (cet instant étant repéré par $t = 0$), la hauteur de la mousse diminue de manière exponentielle au cours du temps, c'est-à-dire qu'en notant $h(t)$ la hauteur à l'instant t on a le modèle suivant :

$$h(t) = Ce^{-t/\tau}$$

où C est la hauteur à l'instant $t = 0$ et τ la constante de temps associée à la décroissance exponentielle. On pourrait même reconnaître différents types de bière à cette constante... Arnd Leike a reçu un prix Nobel "Ig" en 2002 pour cette "découverte".

1. Le modèle n'est pas linéaire par rapport au paramètre τ : montrer qu'en passant en log on obtient un modèle linéaire en les paramètres $x_1 = \log(C)$ et $x_2 = 1/\tau$.

2. Compléter votre module `mdc.py` de l'exercice précédent avec une fonction d'entête :

```
def fit_expo_decay(tm, hm):
```

qui à partir des données $(t_i, h_i)_{1 \leq i \leq m}$ permet d'obtenir la forme standard du problème de moindres carrés de paramètres x_1 et x_2 , appelle la fonction précédente pour obtenir la solution optimale x^* et finalement retourne les deux paramètres C^* et τ^* . Pour former la matrice A de la fonction d'erreur, le moyen le plus simple avec `numpy` est de créer un tableau de 1 de profil $(m, 2)$ avec la fonction `ones` (la première colonne est déjà là) puis de remplacer la deuxième colonne par une affectation vectorielle du type `A[:, 1] = ...`

3. Compléter le script `beer.py`[†] qui contient les données sur les variations de hauteur en fonction du temps pour la bière préférée d'Arnd Leike, à savoir, la "Erdinger Weissbier". Il suffit :

(a) d'appeler la fonction précédente pour déterminer les paramètres optimaux C^* et τ^* ;

(b) et d'afficher la courbe obtenue avec le modèle avec les points expérimentaux, par exemple avec :

```
# C et tau obtenus par moindres carres
tt = np.linspace(0, max(tm), 100);
hh = C*np.exp(-tt/tau);
plt.clf()
plt.plot(tm, hm, 'ro', tt, hh, 'b')
plt.legend(('experience', 'modele'))
```

Il est aussi possible de rajouter d'autres "décorations" (`title, xlabel, ylabel, ...`).

4. Dans l'expérience de Leike, les erreurs sur les mesures de hauteur de mousse δh_i sont estimées : elles sont nulles en moyenne ($\mathbb{E}[\delta h_i] = 0$) et l'écart type est évalué à $\sigma(\delta h_i) = \sigma_i$. Pour cela l'auteur a effectué plusieurs fois l'expérience ; notez que ces erreurs σ_i sont données dans `beer.py` (vecteur `dhm`). Sachant qu'elles sont différentes selon les mesures $\sigma_i \neq Cste \forall i$, il est préférable d'utiliser les moindres carrés pondérés. Cependant comme on passe en log pour obtenir le modèle linéaire, les erreurs ne sont plus les mêmes :

$$\begin{aligned} \log(h_i + \delta h_i) &= \log(h_i (1 + \delta h_i/h_i)) \\ &= \log(h_i) + \log(1 + \delta h_i/h_i) \\ &\simeq \log(h_i) + \delta h_i/h_i \text{ si } |\delta h_i/h_i| \ll 1 \end{aligned}$$

On a donc intérêt à utiliser des moindres carrés pondérés correspondant à des données bruitées dont l'écart type est de σ_i/h_i et donc avec des poids $w_i = h_i/\sigma_i$ (on remarque d'ailleurs que même si $\sigma_i = Cste \forall i$, il faudrait pondérer par $w_i = h_i/Cste$ du fait du passage en log).

L'exercice 5 nous montre qu'il faut alors utiliser la matrice $W \times A$ et le vecteur $W \times b$ où $W = \text{diag}(w_i)$ est la matrice diagonale formée par les poids w_i (cf. page 30 des diapos sur la vectorisation en python sur Arche[‡] pour implémenter l'opération $W \times A$ de façon efficace : ne pas créer de matrice diagonale mais utiliser le *broadcasting*).

Compléter votre module `mdc.py` avec une fonction d'entête :

```
def fit_expo_decay_bis(tm, hm, dhm):
```

qui intègre ces modifications et compléter le script précédent avec cette méthode de moindres carrés pondérés. De même, visualiser graphiquement la concordance du modèle avec les données : on s'apercevra que le modèle prend mieux en compte la première mesure ($t = 0$) qui correspond à une erreur très faible.

Exercice 11*. Moindres carrés régularisés

Soit A une matrice de taille $m \times n$ avec $m \geq n$. On suppose que $\ker A \neq \{0\}$ et dans ce cas les équations normales possèdent généralement une infinité de solutions. Il faut alors un critère pour sélectionner une solution intéressante

[†]. Disponible sur Arche.

[‡]. https://arche.univ-lorraine.fr/pluginfile.php/2473773/mod_resource/content/1/CM_MN_python.pdf

parmi toutes les solutions admissibles et souvent on choisit la solution de norme minimale. Cependant ce critère conduit à des calculs assez sophistiqués et une alternative est de résoudre :

$$\underbrace{(A^\top A + \varepsilon I)}_{G_\varepsilon} x = A^\top b \quad (1)$$

1. Montrer que $\forall \varepsilon > 0$ la matrice G_ε est maintenant définie positive (et donc inversible).
2. On note $\bar{x}_\varepsilon$ l'unique solution du système linéaire (1). Pour $\varepsilon > 0$, on introduit la fonction

$$E_\varepsilon(x) = \underbrace{\|Ax - b\|_2^2}_{=E(x)} + \varepsilon \|x\|_2^2$$

En utilisant le fait que $G_\varepsilon \bar{x}_\varepsilon = A^\top b$, montrer que

$$(G_\varepsilon(x - \bar{x}_\varepsilon) | x - \bar{x}_\varepsilon) = E_\varepsilon(x) - E_\varepsilon(\bar{x}_\varepsilon)$$

pour tout $x \in \mathbb{R}^n$. En déduire que $\bar{x}_\varepsilon$ minimise E_ε .

Pour $\varepsilon \rightarrow 0$, on privilégie la minimisation de $E(x)$ et pour $\varepsilon \rightarrow +\infty$ la minimisation de $\|x\|$ (ce qui finit par nous donner 0!).

Exercice 12*. Mise à jour de l'inverse d'une matrice perturbée. Formule de Sherman-Morrison

Soit A une matrice réelle de taille $n \times n$, symétrique définie positive. On suppose qu'on connaît l'inverse A^{-1} de A . Pour un vecteur $u \in \mathbb{R}^n$ fixé, on considère la matrice $B = A + uu^\top$. Le but de cet exercice est d'établir une formule "rapide" permettant de calculer l'inverse de B à partir de l'inverse de A (connu donc). Cette situation se rencontre par exemple lorsqu'on cherche à mettre à jour un problème de moindres carrés en rajoutant des données et en les traitant de façon "dynamique" (cf. exercice suivant).

1. Montrer que la matrice B est symétrique définie positive (et donc inversible).
2. On note ${}^s A^{-\top}$ l'inverse de $A^\top$. Vérifier que :

$$B^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uu^\top A^{-1}}{1 + u^\top A^{-1}u}$$

(bien comprendre les dimensions...). On a donc $B^{-1} = A^{-1}$ – correction.

3. On note $y = A^{-1}u$. On rappelle que $(CD)^\top = D^\top C^\top$. Montrer que le terme de correction se réécrit :

$$\frac{yy^\top}{1 + u^\top y} = \left(\frac{y}{1 + u^\top y} \right) y^\top$$

et, en utilisant l'expression de droite (c'est-à-dire le "bon" parenthésage), en déduire le nombre d'opérations pour calculer l'inverse de B connaissant déjà l'inverse de A (rmq : ne pas oublier le coût du produit $A^{-1}u$).

Exercice 13*. Moindres carrés dynamiques

On considère un problème de moindres carrés usuel : un modèle linéaire avec n paramètres et une fonction du temps $f(t) = x_1\phi_1(t) + x_2\phi_2(t) + \dots + x_n\phi_n(t)$. On a effectué m mesures ($m \geq n$) et on note M la matrice correspondante avec $M_{ij} = \phi_j(t_i)$ qui est supposée de rang maximal (c-à-d de rang n). On note y le vecteur de $\mathbb{R}^m$ des mesures (les instants de mesure étant notés t_i). On note aussi x la solution de ce problème.

Question préliminaire : rappeler les équations normales vérifiées par x .

On suppose qu'on a calculé x mais aussi l'inverse de la matrice du système linéaire dont x est solution. Des mesures supplémentaires arrivent à des instants $t_{m+1}, t_{m+2}, \dots$ et l'on souhaite affiner "rapidement" l'estimation des paramètres à chaque fois qu'une nouvelle mesure est connue. Pour simplifier, on considère pour le moment une seule mesure supplémentaire à l'instant t_{m+1} que l'on note z (au lieu de y_{m+1}) pour alléger les notations. On

§. Ceci est en fait une convention d'écriture car A étant symétrique, A^{-1} l'est aussi et donc $A^{-\top} = A^{-1}$.

note aussi l le vecteur ligne $[\phi_1(t_{m+1}), \dots, \phi_n(t_{m+1})]$ et x_c la nouvelle solution (intégrant les $m + 1$ mesures donc). Finalement on rappelle que la formule suivante (produit matriciel par bloc) :

$$\begin{bmatrix} C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} = CE + DF$$

fonctionne pourvu que les dimensions des blocs soient compatibles (c-à-d C de taille (m, n_1) , D de taille (m, n_2) , E de taille (n_1, p) et F de taille (n_2, p)).

1. Montrer que la nouvelle matrice des moindres carrés et le nouveau vecteur des mesures s'écrivent, respectivement :

$$\begin{bmatrix} M \\ l \end{bmatrix} \text{ et } \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}$$

2. A l'aide de la formule du produit par blocs, en déduire que x_c est la solution du système linéaire

$$(M^T M + l^T l)x_c = M^T y + l^T z$$

Pourquoi la matrice $M^T M + l^T l$ est-elle inversible ?

3. Finalement en déduire que :

$$x_c = x + K(z - lx)$$

avec $K = (M^T M + l^T l)^{-1} l^T$ (appelée matrice de gain). Dans quel cas n'y a-t-il pas de correction et quelle interprétation en donner ?

4. En utilisant l'exercice précédent, expliquer comment obtenir rapidement la nouvelle solution x_c .

Exercice 14. *Moindres carrés et décomposition QR : une alternative aux équations normales*

Soit A la matrice de taille $(4, 2)$ et le vecteur b donnés par

$$A = \begin{pmatrix} -1.0328 & 1.6546 \\ -2.0656 & -0.9641 \\ -1.0328 & -0.1768 \\ -3.0984 & -1.1409 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -0.0124 \\ -6.8444 \\ 1.3181 \\ -2.3273 \end{pmatrix}.$$

Résoudre le problème de moindres carrés $\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2^2$ en utilisant la décomposition $A = QR$ où la matrice orthogonale Q et la matrice R sont données par

$$Q = \begin{pmatrix} -0.2582 & 0.9564 & -0.1164 & -0.0712 \\ -0.5164 & -0.2238 & -0.2034 & -0.8012 \\ -0.2582 & 0.0407 & 0.9611 & -0.0889 \\ -0.7746 & -0.1831 & -0.1460 & 0.5875 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Indication. Le calcul donne $Q^T b = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$.