

Chapitre 4 : Méthode des moindres carrés

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Généralités	2
1.2	Notion de modèle et de regression linéaire multiple	2
2	Critère des moindres carrés - formulation	2
2.1	Critère	2
2.2	Forme standard	3
2.3	Cas particuliers	4
2.3.1	Caractères transformés	4
2.3.2	Formulation non-linéaire	4
3	Exemples	4
3.1	Exemple 1	4
3.2	Exemple 2	4
4	Recherche d'une solution	5
4.1	Solution géométrique	5
4.2	Solution analytique	6
4.2.1	Dérivation matricielle	6
4.2.2	Calcul de la solution	9
4.3	Interprétation statistique	9
4.4	Conclusion	9
5	Conclusion	10
5.1	Exemple complet	10
5.2	Inconvénients	10

1 Introduction

1.1 Généralités

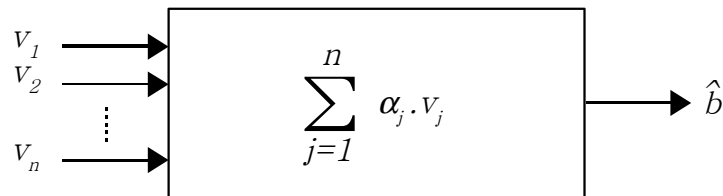
L'étude d'un phénomène peut, le plus souvent, être schématisé de la manière suivante : on s'intéresse à une grandeur b , que nous appellerons par la suite **réponse** ou **variable expliquée**, qui dépend d'un certain nombre de variables v_1, v_2, \dots, v_n que nous appellerons **facteurs** ou **variables explicatives**.

1.2 Notion de modèle et de regression linéaire multiple

On cherche à mettre en évidence la liaison (relation fonctionnelle) pouvant exister entre la variable expliquée b et les variables explicatives v_1, v_2, \dots, v_n . On s'intéresse aux modèles dits linéaires, *i.e.* aux modèles du type :

$$b = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_n v_n = \sum_{j=1}^n \alpha_j v_j$$

les α_j sont des réels appelés **coefficients du modèle**.



Pourquoi \hat{b} et pas b ?

On cherche à expliquer la variable b par n autres variables v_1, v_2, \dots, v_n mais on n'est pas certain que b ne dépend que de ces variables. Dans l'idéal $\hat{b} = b$ mais le plus souvent $\hat{b} \approx b$ avec $\hat{b} \neq b$.

2 Critère des moindres carrés - formulation

2.1 Critère

On cherche donc un modèle qui nous permet d'obtenir un \hat{b} le plus « proche » possible de b . Pour cela, on effectue m mesures ($m > n$) des variables v_1, v_2, \dots, v_n et de b . On cherche alors $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ tel que, pour $i = 1 \dots m$:

$$\hat{b}_i = \alpha_1 v_{i,1} + \alpha_2 v_{i,2} + \dots + \alpha_n v_{i,n} = \sum_{j=1}^n \alpha_j v_{i,j}$$

soit le plus « proche » possible de b_i .

En utilisant les notations matricielles, le système :

$$\begin{cases} \hat{b}_1 = \alpha_1 v_{1,1} + \alpha_2 v_{1,2} + \dots + \alpha_n v_{1,n} \\ \hat{b}_2 = \alpha_1 v_{2,1} + \alpha_2 v_{2,2} + \dots + \alpha_n v_{2,n} \\ \vdots \\ \hat{b}_m = \alpha_1 v_{m,1} + \alpha_2 v_{m,2} + \dots + \alpha_n v_{m,n} \end{cases}$$

s'écrit :

$$\widehat{b} = \underbrace{\begin{pmatrix} v_{1,1} & v_{1,2} & \cdots & v_{1,n} \\ v_{2,1} & v_{2,2} & \cdots & v_{2,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_{m,1} & v_{m,2} & \cdots & v_{m,n} \end{pmatrix}}_A \times \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}}_x$$

Ainsi, on cherche $x = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)^\top$ tel que Ax soit le plus « proche » possible de b . On comprend alors que la notion de distance apparaît. On rappelle que la distance euclidienne usuelle est définie comme suit :

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^m, d(x, y) = \sqrt{\|x - y\|^2}$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne :

$$\forall x \in \mathbb{R}^m, \|x\|^2 = (x | x) = x^\top x = \sum_{j=1}^m x_j^2$$

On souhaite que $d(\widehat{b} = Ax, b)$ soit minimale, ce qui s'écrit :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|^2$$

2.2 Forme standard



Définition 2.1 : On appelle **forme standard d'un problème de moindres carrés** la donnée de

• la matrice $A = \begin{pmatrix} v_{1,1} & v_{1,2} & \cdots & v_{1,n} \\ v_{2,1} & v_{2,2} & \cdots & v_{2,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_{m,1} & v_{m,2} & \cdots & v_{m,n} \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{m,n}$ appelée

← mesure 1
← mesure 2
⋮
← mesure m

↑ ↑ ... ↑
 v_1 v_2 ... v_n

matrice des données

• le vecteur réponse $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$

• l'expression du critère : on cherche $x = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ réalisant :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|^2$$



Remarque 2.2 : On peut également écrire le critère de la façon suivante :

$$x = \arg \min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \|A\alpha - b\|^2$$

2.3 Cas particuliers

2.3.1 Caractères transformés



Remarque 2.3 : Il se peut qu'un caractère explicatif apparaisse sous une forme « transformée » : $\cos(v)$, v^2 , $\ln(v)$, ... Dans ce cas, on considère simplement que la forme transformée du caractère constitue une nouvelle variable explicative.

2.3.2 Formulation non-linéaire



Remarque 2.4 : Il arrive parfois que la relation fonctionnelle entre la variable expliquée et les variables explicatives ne soit pas donnée sous forme linéaire, comme dans l'exemple suivant :

$$b = f(v_1, v_2) = v_1^{\alpha_1} v_2^{\alpha_2}$$

Dans ce cas, on « linéarise » :

$$\ln(b) = \alpha_1 \ln(v_1) + \alpha_2 \ln(v_2)$$

La nouvelle variable expliquée est $b' = \ln(b)$ et les nouvelles variables explicatives sont $\ln(v_1)$ et $\ln(v_2)$.

3 Exemples

3.1 Exemple 1

On s'intéresse à une quantité physique z qui varie selon un paramètre physique t . On pose le modèle

$$z = f(t) = a + bt + ct^2 + dt^3$$

La variable expliquée est z , les variables explicatives sont t , t^2 , t^3 et « 1 » et les paramètres du modèle, que l'on cherche, sont a , b , c et d . On réalise une série de m mesure $(t_i, z_i)_{1 \leq i \leq m}$. La forme standard du problème de moindres carrés correspondant est :

$$\text{On cherche } x = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \text{ réalisant } \min_{x \in \mathbb{R}^4} \|Ax - b\|^2$$

où

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & t_1^3 \\ 1 & t_2 & t_2^2 & t_2^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_m & t_m^2 & t_m^3 \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{m,n} \text{ et } b = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

3.2 Exemple 2

On cherche à déterminer un moyen de convertir des températures données en degré Celsius en degré Fahrenheit. Pour cela, on effectue m mesures de températures en Celsius, que l'on note t^C et en Fahrenheit, que l'on note t^F . On dispose alors d'un m -échantillon $(t_i^C, t_i^F)_{1 \leq i \leq m}$ et on pose le modèle :

$$t^F = \alpha + \beta t^C$$

Le problème s'énonce ainsi :

On cherche $x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ réalisant $\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|^2$

où

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1^C \\ 1 & t_2^C \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m^C \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{m,2} \text{ et } b = \begin{pmatrix} t_1^F \\ t_2^F \\ \vdots \\ t_m^F \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

4 Recherche d'une solution

On fait l'hypothèse que les variables explicatives sont **linéairement indépendantes** (*i.e.* $\text{rang}(A) = n$).

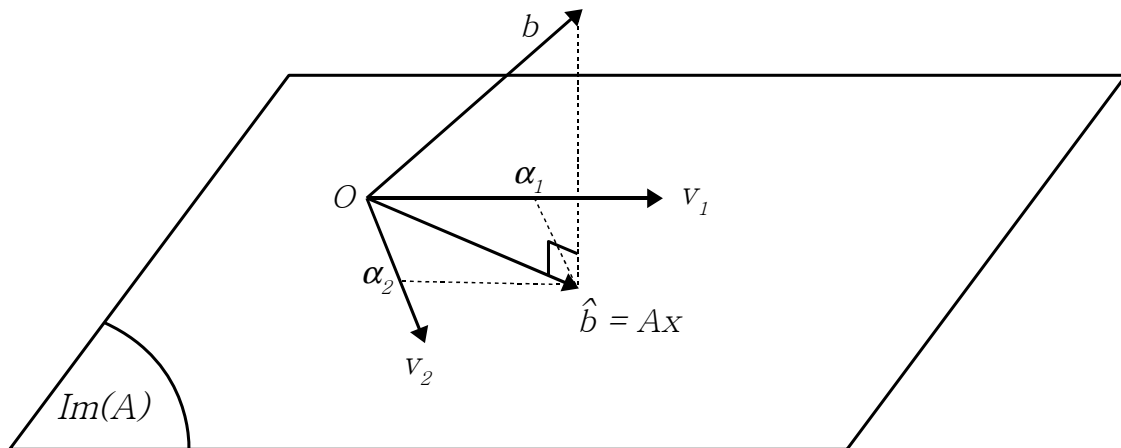
4.1 Solution géométrique

On cherche à exprimer un vecteur comme combinaison linéaire de n vecteurs indépendants. Cette combinaison linéaire appartient, par définition d'un espace vectoriel, à l'espace vectoriel engendré par ces variables explicatives :

$$\text{vect}(v_1, v_2, \dots, v_n) = \text{Im}(A)$$

C'est un sev de \mathbb{R}^m ($m > n$).

On cherche donc $\hat{b} \in \text{Im}(A)$ tel que $\|\hat{b} - b\|^2$ soit minimal : c'est la définition de la projection orthogonale de b sur $\text{Im}(A)$:




Lemme 4.5 : caractérisation de la projection orthogonale sur un sous-espace vectoriel. Soit $x \in \mathbb{R}^k$ et E un sev de \mathbb{R}^k , on a :

$$\begin{aligned} \hat{x} \text{ projeté orthogonal de } x \text{ sur } E \\ \Leftrightarrow \\ x - \hat{x} \text{ est orthogonal à tout vecteur de } E \end{aligned}$$



Dans notre cas, le sous-espace vectoriel est $Im(A)$.

 **Remarque 4.6 :** Tout vecteur de $Im(A)$ s'écrit $A\alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}^n$. α représentant les coordonnées du vecteur dans la base A .

Soit donc $A\alpha \in Im(A)$, on a, d'après la caractérisation de la projection orthogonale :

$$\begin{aligned} (A\alpha | b - \hat{b}) &:= (A\alpha | b - Ax) = 0 && \forall \alpha \in \mathbb{R}^n \\ \Leftrightarrow \alpha^\top A^\top (b - Ax) &= 0 && \forall \alpha \in \mathbb{R}^n \\ \Leftrightarrow A^\top (b - Ax) &= 0 \\ \Leftrightarrow A^\top b - A^\top Ax &= 0 \\ \Leftrightarrow A^\top b &= A^\top Ax \end{aligned}$$

La solution du problème est donc la solution x du système $A^\top b = A^\top Ax$. On peut également affirmer que cette solution est unique (démonstration en TD).

4.2 Solution analytique

Soit $E(x) = \|Ax - b\|^2$ la fonction erreur. On sait que $E(x) \Rightarrow E'(x) = 0$.

Théorème 4.7 : Si E est strictement convexe, alors :

$$E(x) \Leftrightarrow E'(x) = 0$$

(Démonstration page 64 du poly)



 **Remarque 4.8 :** E est strictement convexe. (Démonstration page 65 du poly)

On cherche donc $x \in \mathbb{R}^n$ tel $E'(x) = 0$. Mais encore faut-il savoir dériver une forme quadratique ...

4.2.1 Dérivation matricielle

Notations : On considère une forme linéaire $f : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ et $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{pmatrix}$ un vecteur de \mathbb{R}^k .



Définition 4.9 : On appelle dérivée de f en x et on note $\frac{\partial f}{\partial x}$ ou $\nabla f(x)$ ou encore $f'(x)$ le vecteur colonne des dérivées partielles de f par rapport aux x_i :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Préliminaires



Définition 4.10 : On appelle dérivée directionnelle en x dans la direction d et on note $Df(x, d)$ la limite, quand elle existe :

$$Df(x, d) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon d) - f(x)}{\varepsilon}$$

Proposition 4.11 : Si f est dérivable en x , alors, quelque soit la direction $d \in \mathbb{R}^k$:

$$Df(x, d) = (f'(x) | d) = f'(x)^\top d$$



Remarque 4.12 : Cette égalité nous permet de calculer la dérivée d'une forme linéaire de la façon suivante :

- on calcule $Df(x, d)$
- on exprime cette dernière sous la forme d'un produit scalaire en d : $(Q | d)$ ou on factorise d à droite : $Q^\top d$
- le facteur gauche Q (ou l'autre facteur que d du produit scalaire) est nécessairement $f'(x)$.

Proposition 4.13 : Les dérivées directionnelles dans la direction des vecteurs de la base canonique sont les dérivées partielles :

$$\forall i \in [1, k], \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) = Df(x, e^i)$$



Remarque 4.14 : Cette propriété fournit un moyen simple de calculer les dérivées partielles.


Dérivation de formes linéaires

$$\text{Soit } f : \begin{cases} \mathbb{R}^k & \rightarrow \mathbb{R} \\ x = (x_1, \dots, x_k) & \mapsto a_1 x_1 + \dots + a_k x_k = (x | a) = (a | x) = a^\top x = x^\top a \end{cases}$$

$$\forall i \in [1, k], \frac{\partial f}{\partial x_i} = a_i \text{ donc } f'(x) = \nabla f(x) = \frac{\partial f}{\partial x} = a$$



À retenir : $\forall a, x \in \mathbb{R}^k : \frac{\partial (a^\top x)}{\partial x} = \frac{\partial (x^\top a)}{\partial x} = a$

 **Remarque 4.15 :** On retrouve ce résultat via les dérivées partielles : soit d une direction quelconque

$$\begin{aligned}
 Df(x, d) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon d) - f(x)}{\varepsilon} \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(x + \varepsilon d | a) - (x | a)}{\varepsilon} \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(x | a) + \varepsilon (d | a) - (x | a)}{\varepsilon} \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (d | a) \\
 &= (d | a) = (a | d) = a^\top d \\
 &\Rightarrow f'(x) = a
 \end{aligned}$$

Dérivation d'une forme quadratique




Définition 4.16 : Une forme quadratique est un polynôme homogène de degré 2 avec un nombre quelconque de variables :

$$\begin{aligned}
 f : \quad \mathbb{R}^k &\rightarrow \mathbb{R} \\
 x = (x_1, \dots, x_k) &\mapsto \sum_{i,j=1}^k a_{i,j} x_i x_j
 \end{aligned}$$


En notant $A = (a_{i,j}) \in \mathcal{M}_{k,k}(\mathbb{R})$, f s'écrit :


$$\begin{aligned}
 f : \mathbb{R}^k &\rightarrow \mathbb{R} \\
 x &\mapsto x^\top A x = (x | A x) = (A x | x)
 \end{aligned}$$

 **Remarque 4.17 :** Le calcul de la dérivée d'une forme quadratique s'obtient simplement à l'aide des dérivées directionnelles :


$$\begin{aligned}
 Df(x, d) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \varepsilon d) - f(x)}{\varepsilon} \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(A(x + \varepsilon d) | x + \varepsilon d) - (A x | x)}{\varepsilon} \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(A x | x) + \varepsilon (A x | d) + \varepsilon (A d | x) + \varepsilon^2 (A d | d) - (A x | x)}{\varepsilon} \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (A x | d) + (A d | x) + \varepsilon (A d | d) \\
 &= (A x | d) + (A d | x) = (A x | d) + (A^\top d | x) \\
 &= ((A + A^\top)x | d) \\
 &\Rightarrow f'(x) = (A + A^\top)x
 \end{aligned}$$

 **À retenir :** $\forall x \in \mathbb{R}^k, A \in \mathcal{M}_{k,k} : \frac{\partial(x^\top A x)}{\partial x} = (A + A^\top)x$


 **Remarque 4.18 :** Si A est symétrique, *i.e.* si $A^\top = A$, on a : $\frac{\partial(x^\top A x)}{\partial x} = 2Ax$.
On retrouve, en dimension 1, un résultat bien connu : $\frac{\partial(x^\top a x)}{\partial x} = \frac{\partial a x^2}{\partial x} = 2ax$.

 **Remarque 4.19 :** En particulier, pour $A = I_k$, on a : $\frac{\partial(x^\top x)}{\partial x} = 2x$.

Remarques

 **Remarque 4.20 :** $\forall f, g \in \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}, \lambda, \mu \in \mathbb{R}, \forall x \in \mathbb{R}^k :$

$$\frac{\partial \lambda f + \mu g}{\partial x} = \lambda \frac{\partial f}{\partial x} + \mu \frac{\partial g}{\partial x}$$

 **Remarque 4.21 :** Pour toute quantité G indépendante de x (*i.e.* dans laquelle n'intervient aucun x_i), on a :

$$\frac{\partial G}{\partial x} = 0$$

4.2.2 Calcul de la solution

On a

$$\begin{aligned} E(x) &= \|Ax - b\|^2 \\ &= \|Ax\|^2 - 2(Ax | b) + \|b\|^2 \\ &= x^\top A^\top Ax - 2x^\top A^\top b + b^\top b \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} E'(x) &= \frac{\partial(x^\top A^\top Ax)}{\partial x} - 2 \frac{\partial x^\top A^\top b}{\partial x} + \frac{\partial b^\top b}{\partial x} \\ &= 2A^\top Ax - 2A^\top b + 0 \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} E'(x) = 0 &\Leftrightarrow 2A^\top Ax - 2A^\top b = 0 \\ &\Leftrightarrow A^\top Ax = A^\top b \end{aligned}$$

4.3 Interprétation statistique

On suppose que b est la réalisation d'une variable aléatoire et que $b = Ax + E$ où E est l'erreur, encore appelée variable aléatoire résiduelle, suivant une loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$. $\widehat{b} = Ax$ est alors l'estimateur sans biais¹ du maximum de vraisemblance de b .

4.4 Conclusion

Théorème 4.22 : Soit $A \in \mathcal{M}_{m,n}$ avec $m > n$ et $b \in \mathbb{R}^m$. Une condition nécessaire et suffisante pour que $x \in \mathbb{R}^n$ réalise le minimum de $E(x) = \|Ax - b\|^2$ est que

$$A^\top Ax = A^\top b \tag{1}$$

Les équations (1) sont appelées **équations normales**. Ce système admet toujours au moins une solution. Si la matrice $A^\top A$ est régulière, *i.e.* si $\text{rang}(A) = n$, alors la solution est unique.

¹ $\mathbb{E}[b] = \widehat{b}$

5 Conclusion

5.1 Exemple complet

On reprend l'exemple précédent. On dispose de 14 mesures $(t_i^C, t_i^F)_{1 \leq i \leq 14}$:

On cherche $x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ réalisant $\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|^2$

avec

$$A = \begin{pmatrix} 1 & t_1^C \\ 1 & t_2^C \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m^C \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{m,2} \text{ et } b = \begin{pmatrix} t_1^F \\ t_2^F \\ \vdots \\ t_m^F \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

```
--> A =
1. - 40.
1. - 35.5
1. - 30.5
1. - 25.5
1. - 20.5
1. - 15.5
1. - 10.5
1. - 5.5
1. - 0.5
1. 4.5
1. 19.5
1. 34.5
1. 44.5
1. 49.5

--> b =
- 39.6653
- 32.676712
- 23.814192
- 13.612434
- 3.7645085
5.379745
12.500909
24.28376
32.57308
38.78263
66.65256
93.17702
111.88484
121.51627
```

```
--> A'*A =
14. - 31.5
- 31.5 11263.25

--> A'*b =
393.21766
19215.549
```

Il faut donc résoudre² le système

$$\begin{pmatrix} 14 & -31.5 \\ -31.5 & 11263.25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 393.21766 \\ 19215.549 \end{pmatrix}$$

La solution est : $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 32.1 \\ 1.8 \end{pmatrix}$.

On en déduit que $t^F = 32.1 + 1.8t^C$.

5.2 Inconvénients

La résolution d'un problème de moindres carrés via les équations normales possède deux inconvénients majeurs. D'une part, la perturbation due aux erreurs d'arrondi lorsque l'on passe par les équations normales peut être importante. En effet, si la matrice des données A est légèrement perturbée : $A' = A + \delta A$, le passage aux équations normales va amplifier la perturbation : $(A + \delta A)^\top (A + \delta A) = A^\top A + \delta A^\top A + A^\top \delta A + \delta A^\top \delta A \dots$ alors qu'en

²On peut notamment passer par la décomposition LU pour résoudre le système.

passant par d'autres méthodes de résolution (par exemple factoriser A sous la forme QR où Q est orthogonale et R triangulaire) la perturbation des données sera moindre. D'autre part, le calcul de $A^T A$ peut faire intervenir des overflow ou underflow parasites comme dans l'exemple suivant : Soit la matrice des données suivante

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

avec $\varepsilon \neq 0$. On a bien $\text{rang}(A) = 3$. On a alors

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 + \varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 + \varepsilon^2 \end{pmatrix}$$

Si ε est supérieur au plus petit flottant représentable alors que ε^2 lui est inférieur, soit :

$$\varepsilon^2 < m < \varepsilon$$

la matrice $A^T A$ ne sera plus régulière !

Pour ces problèmes, on recourt à des transformations orthogonales élémentaires, comme celles de Householder ou de Givens. Avec ces méthodes, on obtient une meilleure « stabilité » de notre système.