Outils mathématiques - Optimisation
DEA IVR
Examen du 21 mars 2001
Tous les documents sont autorisés

1 Recherche de la droite la plus proche d'un ensemble de mesures – Conditionnement

Un biologue veut trouver un modèle pour e.g. la croissance d'une culture. Pour ce faire, il effectue des mesures à n instants équidistants, $t_i = t_1 + (i-1)\Delta, i = 1, \ldots, n$. Les mesures qu'il obtient sont des valeurs $y_i, i = 1, \ldots, n$.
Il est supposé que le modèle pour la croissance est une droite :

$$y = ut + v$$

Les paramètres de la droite, u et v, sont obtenus en minimisant le critère :

$$\min_{u,v} \sum_{i=1}^{n} (ut_i + v - y_i)^2 \tag{1}$$

Il s'agit donc d'un problème de moindres carrés linéaires (cf. la section 9 du poly).

(a) Exprimez le Jacobien de la fonction de coût (1).

Le problème ci-dessus peut être résolu en résolvant l'équation matricielle (12) du poly. Exprimez les coefficients de $\mathsf{A} = \mathsf{J}^\mathsf{T}\mathsf{J}$ (A est une matrice 2×2 symétrique) et de $\mathbf{q} = -\mathsf{J}^\mathsf{T}\mathbf{b}$ en fonction des t_i, y_i et de n.

(b) Le conditionnement d'une matrice symétrique (et définie positive)

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$$

est donné par :

$$\frac{a^2 + c^2 + 2b^2}{ac - b^2}$$

Dans la suite, nous examinons le conditionnement de A, donnée par la question (a), en fonction des unités utilisées pour exprimer les instants t_i.

Calculez le conditionnement de A pour $n = 4$ et les trois cas de figures :

- $t_1 = \Delta = 180sec$, donc : $t_1 = 180, t_2 = 360, t_3 = 540, t_4 = 720$.
- $t_1 = \Delta = 3min$, donc : $t_1 = 3, t_2 = 6, t_3 = 9, t_4 = 12$.
- $t_1 = \Delta = 0.05h$, donc : $t_1 = 0.05, t_2 = 0.1, t_3 = 0.15, t_4 = 0.2$.

(c) La question (b) montre que le conditionnement de A dépend fortement des unités (de temps) utilisées. Ici, nous montrons qu'il dépend également de l'origine choisie. Pour ce faire, calculez le conditionnement de A pour $n = 4$ et les deux cas de figures :

- $t_1 = 0min, \Delta = 3min$, donc : $t_1 = 0, t_2 = 3, t_3 = 6, t_4 = 9$.
- $t_1 = -4.5min, \Delta = 3min$, donc : $t_1 = -4.5, t_2 = -1.5, t_3 = 1.5, t_4 = 4.5$.

(d) On peut montrer que le conditionnement de A est le mieux possible (égal à 2) si A est une matrice diagonale et si les éléments sur la diagonale sont identiques (ceci n'est pas le seul cas pourtant). Déterminez t_1 et Δ qui donnent lieu au conditionnement optimal de la matrice A de la question (a).

Conseils :

- D'abord déterminer t_1 en fonction de Δ, puis résoudre pour Δ.
- Les formules suivantes peuvent être utiles :

$$\sum_{i=1}^{n} i = \frac{n(n+1)}{2}$$

$$\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$

(e) Considérons maintenant le cas général, où les mesures y_i ne sont plus forcément obtenues à des instants de temps équidistants. Les paramètres de la droite sont alors déterminés en résolvant :

$$\min_{u,v} \sum_{i=1}^{n} (ut_i + v - y_i)^2$$

pour des t_i quelconques.

Nous voulons optimiser le conditionnement de $\mathsf{A} = \mathsf{J}^\mathsf{T}\mathsf{J}$, en choisissant l'unité et l'origine appropriées pour les t_i. Pour ce faire, considérons de "nouveaux" instants de temps t'_i avec :

$$t'_i = s\,(t_i - m) \quad \forall i = 1, \ldots, n$$

Donnez les expressions pour le changement d'origine (m) et d'unité (s) (en fonction de n et des t_i) qui donnent lieu au conditionnement optimal de A.

Exprimez la solution pour l'origine avec des mots (une phrase).

A Solutions

(a) En reprenant la formulation des problèmes de moindres carrés utilisée lors du cours :

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(r_i(\mathbf{x}))^2 \\
\text{avec } r_i(\mathbf{x}) &= ut_i + v - y_i \\
\text{avec les inconnues } \mathbf{x} &= \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \\
\text{et avec } a_i &= \begin{pmatrix} t_1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -y_1 \\ \vdots \\ -y_n \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Le Jacobien est donc :

$$
\mathsf{J}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial u}(\mathbf{x}) & \frac{\partial r_1}{\partial v}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial r_2}{\partial u}(\mathbf{x}) & \frac{\partial r_2}{\partial v}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial r_n}{\partial u}(\mathbf{x}) & \frac{\partial r_n}{\partial v}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ t_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_n & 1 \end{pmatrix}
$$

La matrice $\mathsf{A} = \mathsf{J}^\mathsf{T}\mathsf{J}$:

$$
\begin{aligned}
\mathsf{A} &= \begin{pmatrix} t_1 & t_2 & \cdots & t_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ t_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_n & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n t_i^2 & \sum_{i=1}^n t_i \\ \sum_{i=1}^n t_i & \sum_{i=1}^n 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n t_i^2 & \sum_{i=1}^n t_i \\ \sum_{i=1}^n t_i & n \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Le vecteur $\mathbf{q} = -\mathsf{J}^\mathsf{T}\mathbf{b}$:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{q} &= -\begin{pmatrix} t_1 & t_2 & \cdots & t_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -y_1 \\ \vdots \\ -y_n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n t_i y_i \\ \sum_{i=1}^n y_i \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

(b) La matrice A, dans le cas présent, est donnée par :

$$\begin{aligned}
\mathsf{A} &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{4}\left(t_1+(i-1)\Delta\right)^2 & \sum_{i=1}^{4}\left(t_1+(i-1)\Delta\right) \\ \sum_{i=1}^{4}\left(t_1+(i-1)\Delta\right) & 4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 4t_1^2+2\Delta t_1\sum_{i=1}^{4}(i-1)+\Delta^2\sum_{i=1}^{4}(i-1)^2 & 4t_1+\Delta\sum_{i=1}^{4}(i-1) \\ 4t_1+\Delta\sum_{i=1}^{4}(i-1) & 4 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 4t_1^2+12\Delta t_1+14\Delta^2 & 4t_1+6\Delta \\ 4t_1+6\Delta & 4 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Le conditionnement est donc :

$$\begin{aligned}
\kappa &= \frac{\left(4t_1^2+12\Delta t_1+14\Delta^2\right)^2+4^2+2\left(4t_1+6\Delta\right)^2}{4\left(4t_1^2+12\Delta t_1+14\Delta^2\right)-\left(4t_1+6\Delta\right)^2} \\
&= \frac{4}{4}\frac{\left(2t_1^2+6\Delta t_1+7\Delta^2\right)^2+4+2\left(2t_1+3\Delta\right)^2}{4t_1^2+12\Delta t_1+14\Delta^2-\left(2t_1+3\Delta\right)^2} \\
&= \frac{4t_1^4+24t_1^3\Delta+64t_1^2\Delta^2+84t_1\Delta^3+49\Delta^4+4+8t_1^2+24t_1\Delta+18\Delta^2}{5\Delta^2}
\end{aligned}$$

En remplaçant les valeurs pour les trois cas de figures, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{59049405001}{40500} &\approx 1458010 \\
\frac{18679}{45} &\approx 415 \\
\frac{26409}{80} &\approx 330
\end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned}
\frac{827}{9} &\approx 92 \\
\frac{2041}{180} &\approx 11
\end{aligned}$$

(d) Nous avons

$$\begin{aligned}
\mathsf{A} &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n t_i^2 & \sum_{i=1}^n t_i \\ \sum_{i=1}^n t_i & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n (t_1 + (i-1)\Delta)^2 & \sum_{i=1}^n (t_1 + (i-1)\Delta) \\ \sum_{i=1}^n (t_1 + (i-1)\Delta) & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} nt_1^2 + 2t_1\Delta \sum_{i=1}^n (i-1) + \Delta^2 \sum_{i=1}^n (i-1)^2 & nt_1 + \Delta \sum_{i=1}^n (i-1) \\ nt_1 + \Delta \sum_{i=1}^n (i-1) & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} nt_1^2 + 2t_1\Delta \sum_{i=0}^{n-1} i + \Delta^2 \sum_{i=0}^{n-1} i^2 & nt_1 + \Delta \sum_{i=0}^{n-1} i \\ nt_1 + \Delta \sum_{i=0}^{n-1} i & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} nt_1^2 + 2t_1\Delta \frac{(n-1)n}{2} + \Delta^2 \frac{(n-1)n(2(n-1)+1)}{6} & nt_1 + \Delta \frac{(n-1)n}{2} \\ nt_1 + \Delta \frac{(n-1)n}{2} & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} nt_1^2 + t_1\Delta(n-1)n + \Delta^2 \frac{(n-1)n(2(n-1)+1)}{6} & nt_1 + \Delta \frac{(n-1)n}{2} \\ nt_1 + \Delta \frac{(n-1)n}{2} & n \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Nous voulons déterminer t_1 et Δ tels que A soit diagonale et que ses éléments sur la diagonale soient identiques. La diagonalité s'exprime par :

$$\begin{aligned}
& nt_1 + \Delta \frac{(n-1)n}{2} = 0 \\
\Rightarrow \quad & t_1 + \Delta \frac{n-1}{2} = 0 \\
\Rightarrow \quad & t_1 = -\frac{n-1}{2}\Delta
\end{aligned}$$

La deuxième condition, l'égalité des éléments sur la diagonale de A, s'exprime par

$$nt_1^2 + t_1\Delta(n-1)n + \Delta^2 \frac{(n-1)n\,(2(n-1)+1)}{6} = n$$

En remplaçant la solution pour t_1, on obtient

$$\begin{aligned}
& \Delta^2 \left(\frac{(n-1)^2}{4} - \frac{(n-1)^2}{2} + \frac{(n-1)\,(2(n-1)+1)}{6} \right) = 1 \\
\Rightarrow \quad & \Delta^2 \frac{-3\,(n-1)^2 + 2(n-1)\,(2(n-1)+1)}{12} = 1 \\
\Rightarrow \quad & \Delta^2 \frac{(n-1)(n+1)}{12} = 1 \\
\Rightarrow \quad & \Delta = 2\sqrt{\frac{3}{(n-1)(n+1)}}
\end{aligned}$$

La solution pour t_1 est donc :

$$t_1 = -\sqrt{\frac{3(n-1)}{n+1}}$$

(e) Nous avons

$$\begin{aligned}
\mathsf{A} &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n {t'_i}^2 & \sum_{i=1}^n t'_i \\ \sum_{i=1}^n t'_i & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} s^2 \sum_{i=1}^n (t_i^2 - 2mt_i + m^2) & s \sum_{i=1}^n (t_i - m) \\ s \sum_{i=1}^n (t_i - m) & n \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} s^2 \left(\sum_{i=1}^n t_i^2 - 2m \sum_{i=1}^n t_i + nm^2\right) & s \left(\sum_{i=1}^n t_i - nm\right) \\ s \left(\sum_{i=1}^n t_i - nm\right) & n \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

La première condition (diagonalité de A) donne :

$$m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n t_i$$

Le choix de m revient à choisir comme origine le “centre de gravité” des données originales (i.e. la somme des t'_i est zéro). En quelque sorte, on déplace l’origine tel que les données soient “bien distribuées” autour d’elle. Considérons les questions (b) et (c) : le meilleur conditionnement dans le cas de min comme unité, était obtenu en choisissant $t_1 = -4.5min, \ldots, t_4 = 4.5min \ldots$

Après avoir déplacé l’origine, on choisi l’unité qui donne le meilleur conditionnement (ici, la variable s). L’égalité des éléments sur la diagonale donne :

$$\begin{aligned}
& s^2 \left(\sum_{i=1}^n t_i^2 - 2m \sum_{i=1}^n t_i + nm^2 \right) = n \\
\Rightarrow \quad & s^2 \left(\sum_{i=1}^n t_i^2 - \frac{2}{n} \left(\sum_{i=1}^n t_i \right) \left(\sum_{i=1}^n t_i \right) + \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2 \right) = n \\
\Rightarrow \quad & s^2 \left(\sum_{i=1}^n t_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2 \right) = n \\
\Rightarrow \quad & s^2 = \frac{n}{\sum_{i=1}^n t_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2}
\end{aligned}$$