

MOTIVATION

On propose de modéliser un ensemble de données expérimentales avec une fonction. On connaît la *forme* de la fonction mais pas la fonction exacte. Par exemple, on connaît peut-être que la fonction devrait être une droite sans savoir les coefficients exactes.

On a donc un système d'approximations: chaque point représente une approximation de la droite. Les inconnues, c'est-à-dire les variables, sont alors les coefficients de la droite.

Exemple 10.1. Pour chaque valeur de x , on a mesuré une valeur y . Les valeurs y sont sujettes à divers erreurs. On pense que les valeurs devraient être reliées par une fonction $y = \alpha x + \beta$. Voici les données; le but est de déterminer α et β .

x	0	1	2	3	4	5	
y	1	2	2	3	3	4	□

En voulant que les données de l'exemple 10.1 suivent la fonction, on cherche une solution au système suivant.

$$\begin{cases} (1) = \alpha(0) + \beta \\ (2) = \alpha(1) + \beta \\ (2) = \alpha(2) + \beta \\ (3) = \alpha(3) + \beta \\ (3) = \alpha(4) + \beta \\ (4) = \alpha(5) + \beta \end{cases} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \\ 5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Le système $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ à droite ne possède aucune solution, donc on cherche la meilleure approximation $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$. Notre but c'est de comprendre comment résoudre $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$.

Exercice 10.2. Vérifier que le système $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ provenant de l'exemple 10.1 ne possède aucune solution exacte. □

Exercice 10.3. Faire un graphique des données de l'exemple 10.1 et faire une estimation visuelle de la droite. □

Avertissement: j'ai utilisé ici x, y pour représenter les données. Ce n'est pas la même chose que \mathbf{x} , le vecteur qui décrit la droite.

APPROXIMATION DE DROITES I : PROJECTIONS

Afin de résoudre $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$, on peut commencer avec la question suivante: quelle est la meilleure approximation $\hat{\mathbf{b}} \approx \mathbf{b}$ tel que $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$ possède une solution exacte?

“Meilleure approximation” veut dire que $\|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|$ est un vecteur aussi petit que possible, sujet à la contrainte que $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$ possède une solution exacte. Que $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$ possède une solution

exacte équivaut à dire que $\hat{\mathbf{b}}$ est dans l'espace engendré par les colonnes de A , $\text{col}(A)$. On reconnaît

$$\mathbf{b} = \hat{\mathbf{b}} + (\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}) = \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b}) + (\mathbf{b} - \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b}))$$

Le vecteur $\hat{\mathbf{b}}$ est exactement la projection de \mathbf{b} sur l'espace engendré par les colonnes de A .

Afin de calculer la projection, on transforme les colonnes de A en base orthogonale... méthode de Gram-Schmidt bien sûr! Posons $\mathbf{a}_1 = [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T$ et $\mathbf{a}_2 = [0 \ 1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5]^T$. La base orthogonale serait alors $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2\}$ avec

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1 &= \mathbf{a}_1 = [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1]^T \\ \mathbf{u}_2 &= \mathbf{a}_2 - \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1} \mathbf{u}_1 = \mathbf{a}_2 - \frac{15}{6} \mathbf{u}_1 = \frac{1}{2} [-5 \ -3 \ -1 \ 1 \ 3 \ 5]^T\end{aligned}$$

Exercice 10.4. Dans la méthode de Gram-Schmidt, on a pris les colonnes de A dans la "mauvaise" ordre. En réalité, tout ordre est bon. Refaire Gram-Schmidt en commençant avec l'autre colonne de A . \square

Sachant une base orthogonale pour $\text{col}(A)$, on peut calculer $\hat{\mathbf{b}}$ comme projection:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{b}} &= \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b}) \\ &= \text{proj}_{\mathbf{u}_1}(\mathbf{b}) + \text{proj}_{\mathbf{u}_2}(\mathbf{b}) \\ &= \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1} \mathbf{u}_1 + \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{u}_2}{\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{u}_2} \mathbf{u}_2 \\ &= \frac{15}{6} \mathbf{u}_1 + \frac{19/2}{70/4} \mathbf{u}_2 \\ &= \frac{5}{2} [1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1] + \frac{19}{70} [-5 \ -3 \ -1 \ 1 \ 3 \ 5]^T \\ &= \frac{1}{35} [40 \ 59 \ 78 \ 97 \ 116 \ 135]^T\end{aligned}$$

Si on remplace les valeurs y dans les données originales par celles-ci, les points seront tous exactement alignés sur la droite optimale. On résout directement $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$.

$$\left[\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 40/35 \\ 1 & 1 & 59/35 \\ 2 & 1 & 78/35 \\ 3 & 1 & 97/35 \\ 4 & 1 & 116/35 \\ 5 & 1 & 135/35 \end{array} \right] \rightarrow \dots \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 19/35 \\ 0 & 1 & 40/35 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right]$$

Ceci donne la solution

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 19/35 \\ 8/7 \end{bmatrix}$$

Exercice 10.5. La matrice augmentée précédente possède beaucoup plus de rangées que de colonnes. On voit que — heureusement! — les rangées sans pivots sont toutes complètement nulles. Il n'y a eu aucune "rangée contradictoire". Expliquer pourquoi ceci n'est pas dû à l'hasard, mais serait toujours le cas pour le système $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$. En autres mots, expliquer pourquoi le système $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$ est toujours consistant. \square

La droite optimale est alors $y = \frac{19}{35}x + \frac{8}{7}$.

Exercice 10.6. Faire un graphique, incluant les données originales, les données ajustées ($\hat{\mathbf{b}}$ au lieu de \mathbf{b}) et la droite optimale. \square

Pour résumer:

Algorithme 10.7 (Résoudre $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ par projections). *On cherche à trouver la meilleure solution approximative de $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$.*

1. Transformer les colonnes de A en base orthogonale, à l'aide de la méthode Gram-Schmidt.
2. Calculer $\hat{\mathbf{b}} = \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b})$ en utilisant la base orthogonale. Le vecteur $\hat{\mathbf{b}}$ représente les données "ajustées", qui suivent la droite exactement.
3. Solutionner $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$, afin de trouver \mathbf{x} . Ceci donne directement la droite. \square

APPROXIMATION DE DROITES II : ÉQUATIONS NORMALES

Il y a une autre méthode, qui évite la méthode de Gram-Schmidt et la projections, et qui donne aussi une matrice plus petite pour réduire.

On a déjà vu que

$$\mathbf{b} = \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b}) + (\mathbf{b} - \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b}))$$

Le premier vecteur à droite est dans l'espace $\text{col}(A)$: c'est l'observation qui a motivée la méthode des projections. Le *deuxième* vecteur à droite est orthogonal à $\text{col}(A)$, voulant dire que le produit scalaire du deuxième vecteur avec chaque colonne de A est 0, voulant dire que A^T multiplié par le deuxième vecteur donne $\mathbf{0}$.

$$\mathbf{0} = A^T (\mathbf{b} - \text{proj}_{\text{col}(A)}(\mathbf{b})) = A^T (\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}) = A^T (\mathbf{b} - A\mathbf{x}) = A^T \mathbf{b} - A^T A\mathbf{x}$$

Donc on cherche à résoudre $A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$. Note que c'est une égalité: c'est un système linéaire ordinaire. On calcul

$$A^T A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \\ 5 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 55 & 15 \\ 15 & 6 \end{bmatrix} \quad A^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 47 \\ 15 \end{bmatrix}$$

On peut maintenant résoudre le système d'ÉQUATIONS NORMALES.

$$\left[\begin{array}{cc|c} 55 & 15 & 47 \\ 15 & 6 & 15 \end{array} \right] \rightarrow \cdots \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 19/35 \\ 0 & 1 & 8/7 \end{array} \right]$$

On a la solution

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 19/35 \\ 8/7 \end{bmatrix}$$

On peut maintenant calculer $\hat{\mathbf{b}}$, car $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$, et on connaît maintenant \mathbf{x} .

$$\hat{\mathbf{b}} = A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \\ 5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 19/35 \\ 8/7 \end{bmatrix} = \frac{1}{35} \begin{bmatrix} 40 \\ 59 \\ 78 \\ 97 \\ 116 \\ 135 \end{bmatrix}$$

Note qu'on a solutionné le système $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$, *sans connaître* $\hat{\mathbf{b}}$. Ceci permet de trouver $\hat{\mathbf{b}}$ directement.

Pour ceux qui veulent comprendre la différence entre ces deux méthodes, on propose l'exercice (la discussion!) suivante.

Exercice 10.8. Cette méthode semble beaucoup plus simple. Mais regarder de près les calculs de $A^T A$ et $A^T \mathbf{b}$, et comparer avec la méthode de Gram-Schmidt et le calcul de $\hat{\mathbf{b}}$ dans la méthode des projections. Est-ce qu'on a *vraiment* évité la méthode de Gram-Schmidt? De plus, la matrice, bien que petite, possède des “grands” chiffres, donc la réduction est moins facile qu'elle ne paraît. La matrice augmentée de la méthode de projections est plus grande, mais ce n'est pas nécessaire de compléter la réduction, grâce à l'exercice 10.5 (n'est-ce pas?). Est-ce que ce sont vraiment deux méthodes différentes? \square

Il reste une difficulté. Ici le système $A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ était consistant. Serait-ce toujours le cas? Si les colonnes de A sont indépendants, alors oui, grâce au résultat suivant. On se rappelle que le RANG d'une matrice est le nombre de pivots dans sa forme échelonnée.

Théorème 10.9. *Pour toute matrice A , le rang de $A^T A$ est égal au rang de AA^T est égal au rang de A .* \square

On ne démontrera pas ce théorème, mais on verra plus tard une version plus générale. Pour le moment on observe simplement que si les colonnes de A sont indépendantes, alors le rang de A est égale à n (nombre de colonnes de A), et alors $A^T A$ à aussi n pivots; étant une matrice carré, ceci garantit que $A^T A\mathbf{x} = \mathbf{d}$ possède une solution unique pour tout \mathbf{d} (en particulier, $\mathbf{d} = A^T \mathbf{b}$).

Mais alors comment sait-on que les colonnes de A sont indépendantes? La réponse est que parfois, elles ne le sont pas! Si les colonnes ne sont pas indépendantes, ceci veut dire qu'il n'y a pas une seule droite optimale, mais plusieurs. Par exemple, si l'exemple 10.1 n'avait qu'un seul point, on aurait une matrice A avec des colonnes dépendantes.

Exercice 10.10. Montrer que si les données originales ont au moins deux points, alors les colonnes de A seront indépendantes. Postuler une explication géométrique de ceci. \square

En bref: le système $A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ serait “toujours” consistant.

Pour résumer:

Algorithme 10.11 (Résoudre $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ par équations normales). *On cherche à trouver la meilleure solution approximative de $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$.*

1. On calcul $A^T A$ et $A^T \mathbf{b}$.
2. On résout (exactement) $A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$. Ceci donne la droite.
3. On calcul $\hat{\mathbf{b}}$ par $\hat{\mathbf{b}} = A\mathbf{x}$. Ceci donne les données “ajustées”, qui suivent la droite exactement. \square

APPROXIMATION DE DROITES III : MATRICES DE PROJECTION

Il y a une autre approche qui est parfois utile.

On a observé que le rang de $A^T A$ est égal au nombre de colonnes; de plus c'est une matrice carré. Donc c'est une matrice inversible. Ceci permet une variante de l'approche précédente. Afin de résoudre $A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ on peut utiliser l'inverse.

$$(A^T A)^{-1} (A^T A) \mathbf{x} = (A^T A)^{-1} (A^T \mathbf{b}) = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$$

Note que cette expression ne peut pas se simplifier! Ensuite on calcul $\hat{\mathbf{b}}$ directement.

$$\hat{\mathbf{b}} = A \mathbf{x} = A (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$$

Donc on pose $M = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$ et $N = AM = A (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$, et on a alors

$$\mathbf{x} = M \mathbf{b} \qquad \hat{\mathbf{b}} = N \mathbf{b}$$

Ceci montre que si A est constante, alors les calculs de \mathbf{x} et $\hat{\mathbf{b}}$ sont des transformations linéaires.

Typiquement cette méthode, bien qu'elle paraît moins compliquée, requiert plus de calculs. Une situation où elle se montre utile. Les valeurs x dans les données correspondent souvent à l'organisation de l'expérience (sondage, investigation, etc), tandis que les valeurs y correspondent souvent aux valeurs mesurées. Donc si on répète l'expérience, la matrice A peut demeurer constante, et don on pourra calculer M et N une fois, et les réutiliser pour chaque nouvelle \mathbf{b} .

APPROXIMATIONS DE FONCTIONS GÉNÉRALES

On peut comprendre l'équation $A \mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ comme étant une représentation matricielle des données et de la droite désirée à la fois. Le vecteur \mathbf{b} est exactement les valeurs y . Le produit matricielle $A \mathbf{x}$ représente l'évaluation des valeurs x dans la droite.¹

Cette méthode s'adapte à des fonctions plus générales.

Exemple 10.12. Considérons encore le données de l'exemple 10.1, mais cette fois on trouvera une fonction de la forme $\alpha x^2 + \beta x + \gamma$. Revoici les données:

x	0	1	2	3	4	5
y	1	2	2	3	3	4

Chaque rangée de $A \mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ représente une des données. Par exemple, la première est $(0, 1)$, qui est supposé de respecter la fonction $y = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$. Donc on a

$$\alpha(0)^2 + \beta(0) + \gamma = 1$$

Pour la deuxième rangée on a la donnée $(1, 2)$, donc

$$\alpha(1)^2 + \beta(1) + \gamma = 2$$

¹ Rappel: les valeurs x ne sont pas la même chose que le vecteur \mathbf{x} .

En total, on forme la version matricielle.

$$\begin{bmatrix} (0)^2 & (0) & 1 \\ (1)^2 & (1) & 1 \\ (2)^2 & (2) & 1 \\ (3)^2 & (3) & 1 \\ (4)^2 & (4) & 1 \\ (5)^2 & (5) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \\ 25 & 5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Exercice 10.13. On cherche à trouver, pour les mêmes données, la meilleure équation de la forme $y = \alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta$. Donner la forme matricielle $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ qui convient. NB: si vous voulez le résoudre, un solveur serait utile! \square

Exercice 10.14. On cherche à trouver, pour les mêmes données, la meilleure équation de la forme $y = \alpha 2^x + \beta x + \gamma$. Donner la forme matricielle $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ qui convient. NB: si vous voulez le résoudre, un solveur serait utile! \square

ERREUR DE L'APPROXIMATION

On trouvant une solution approximative, on a trouvé des valeurs $\hat{\mathbf{b}}$ qui suivent la fonction désirée exactement, au lieu des valeurs \mathbf{b} originales. Donc l'erreur de l'approximation est dans ce terme. En fait, on a présumé que dans les données, les x étaient toujours exacte, et les y douteux. C'est souvent le cas, ou plutôt c'est souvent le cas que l'erreur soit concentré dans une partie. Un traitement plus générale dépasse notre cours.

Donc on a trouvé un $\hat{\mathbf{b}}$ qui est aussi proche de \mathbf{b} que possible. Ceci minimise la distance entre $\hat{\mathbf{b}}$ et \mathbf{b} , soit $\|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|$. On pose $\mathbf{e} = \mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}$; donc chaque composant de \mathbf{e} représente l'erreur entre la valeur mesurée et la valeur de la droite. Précisément, chaque composant représente la distance entre les données originales et les données ajustées dans votre graphique de l'exercice 10.6. En minimisant $\|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|$, on minimise également $\|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2$, et donc

$$\|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2 = e_1^2 + e_2^2 + \dots + e_m^2$$

où m est le nombre de données (nombre de rangées dans A). On minimise la somme des carrés: c'est la raison pourquoi cette méthode s'appelle parfois la méthode des MOINDRES CARRÉS.

On pourra donc comprendre la solution de $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$ comme

$$\min \|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|^2 \quad \text{s.c. } \hat{\mathbf{b}} \in \text{col}(A)$$

C'est une optimisation quadratique.