



COLLÈGE DE FRANCE

MÉTHODE D'APPROXIMATION DANS UN PROBLÈME
À PARAMÉTRISATION GÉNÉRALE

1963

Publié par le Collège de France
à Paris, chez les Éditions de la Sorbonne

Laboratoire de Physique Théorique

Place M. de la Sorbonne, 75005 Paris

1963 - 280 pages

**METHODE D'AJUSTEMENT DANS UN PROBLEME
A PARAMETRISATION HIERARCHISEE**

P. Billoir
Laboratoire de Physique Corpusculaire
Collège de France, Paris

LPC 84-39

METHODE D'AJUSTEMENT DANS UN PROBLEME
A PARAMETRISATION HIERARCHISEE

P. Billoir

Laboratoire de Physique Corpusculaire
Collège de France, Paris

Résumé :

Dans certains problèmes on cherche à ajuster par moindres carrés, sur une grande quantité de données, un petit nombre de paramètres généraux, ainsi que des paramètres particuliers à de petits sous-ensembles de données. Des exemples sont fournis, et une méthode est proposée pour faire varier tous les paramètres à chaque itération (ce qui assure une convergence optimale) tout en maintenant le volume des calculs à peu près proportionnel au nombre de paramètres.

Abstract :

In some problems one has to perform a least squares fit on a large sample of data, with few general parameters and other ones particular to small data subsets. Examples are given, and a method is proposed to vary all parameters at each iteration (ensuring optimal convergence) while keeping the amount of calculation roughly proportional to the number of parameters.

1. DÉFINITION DU PROBLÈME :

1.1. Formulation générale :

On cherche à ajuster un ensemble de paramètres à un ensemble de données, sachant que chaque donnée ne dépend que d'un petit nombre de paramètres. Deux paramètres seront dits "connectés" s'il existe des données qui dépendent de ces deux paramètres à la fois ; on parlera de paramétrisation "hiérarchisée" si les paramètres peuvent être groupés en sous-ensemble entre lesquels les connexions ont une structure en arbre. Le formalisme d'ajustement par moindres carrés linéarisé conduit alors à résoudre, à chaque itération, un système linéaire dans lequel beaucoup de coefficients sont nuls, ce qui permet d'utiliser un algorithme de résolution plus rapide que la méthode générale (impraticable si le nombre de paramètres est trop grand).

On examinera en détail le cas particulier suivant : les paramètres se répartissent en un sous-ensemble de paramètres généraux (connectés à tous les autres) et des sous-ensembles de paramètres particuliers (liés les uns seulement entre eux et aux paramètres généraux). En d'autres termes : on peut répartir les données en N sous-ensembles $\{x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_k}\}$ ($i = 1, \dots, N$) et les paramètres en un sous-ensemble $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p\}$ et N sous-ensembles $\{\beta_{i_1}, \beta_{i_2}, \dots, \beta_{i_k}\}$ tels que les x_{i_k} ne dépendent que des α_j et des β_{i_k} (et pas des β_{i_k} si $i \neq j$).

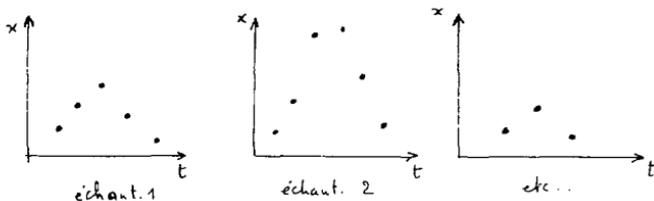
1.2. Exemple 1 : étalonnage de la forme d'un signal par échantillonnage discret, et calibration :

Considérons un signal défini en fonction d'une variable t (le temps par exemple) par une équation du type :

$$A(t) = a f(\alpha_1 \dots \alpha_p; t - \tau)$$

Les paramètres $\alpha_1 \dots \alpha_p$ fixent la forme de ce signal, a et τ représentent respectivement son amplitude globale (facteur multiplicatif) et son décalage en temps par rapport à une origine arbitraire.

On dispose d'un ensemble d'échantillons discrets de ce signal, pris avec des amplitudes et des décalages variables (et inconnus a priori), mais supposés tous de la même forme. L'échantillon i consiste en une série de valeurs du signal ($x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}$) mesurées aux temps ($t_{i_1}, t_{i_2}, \dots, t_{i_n}$).



On veut déterminer la forme de ce signal (c'est à dire les paramètres $\alpha_1 \dots \alpha_p$), et éventuellement, les paramètres a_i et τ_i pour chaque échantillon (si on veut calibrer des voies électroniques différentes, par exemple).

Remarque 1 : Il n'est pas nécessaire que les échantillons aient le même nombre de points, ni que ces points soient à intervalles réguliers ou répétitifs d'un échantillon à l'autre. Cependant, un échantillon qui ne comporte que deux points n'apporte aucune information sur les paramètres généraux α_j ; il ne peut servir qu'à déterminer a_i et τ_i pour cet échantillon. Un échantillon à un point ne sert à rien.

Remarque 2 : On pourra tenir compte de corrélations à l'intérieur d'un échantillon. En principe, les erreurs de mesure doivent être indépendantes d'un échantillon à l'autre ; toutefois, une extension du formalisme sera proposée pour de faibles corrélations (voir 4.1.)

Remarque 3 : Le choix de a et τ comme paramètres particuliers n'a rien d'impératif. On peut supposer l'un ou l'autre comme connu, ou comme un paramètre général (si le signal est parfaitement reproductible en amplitude ou en temps). On peut aussi ajouter d'autres paramètres particuliers, comme un piédestal variable d'un échantillon à l'autre : $A(t) = p + a f(\alpha_1, \dots, \alpha_p; t - \tau)$. Dans ce cas, il faudra au moins quatre points pour avoir une information sur les α_j .

1.3. Deuxième exemple : ajustement de vertex :

Les données sont des mesures effectuées sur chacune des traces séparément, ou des quantités calculées, trace par trace, à partir de ces mesures.

Les paramètres à ajuster sont d'une part les coordonnées du vertex (paramètres généraux) et d'autre part les composantes de l'impulsion de chaque particule au vertex (paramètres particuliers).

La trajectoire théorique d'une particule est entièrement définie à partir des coordonnées du vertex et de l'impulsion de cette particule au vertex.

Un formalisme détaillé pour ce problème est développé dans (1,2).

2. PRINCIPES ET AVANTAGES DE LA MÉTHODE :

C'est la méthode des moindres carrés itérative (à chaque itération on linéarise la dépendance des variables par rapport aux paramètres). Si P est le nombre total de paramètres (généraux + particuliers), on obtient, à chaque itération, un système linéaire de P équations à P inconnues (les accroissements à donner à chaque paramètre).

Si P est grand, la résolution de ce système par une méthode générale est très longue (le nombre de calculs augmente comme P^3), voire impossible.

Pour éviter cette difficulté, on emploie parfois la méthode d'ajustement "alterné" qui consiste à :

- 1) A partir d'une première estimation des paramètres particuliers, ajuster les paramètres généraux seulement.
- 2) En fixant ces valeurs des paramètres généraux, ajuster séparément chaque sous-ensemble de paramètres particuliers. Puis on recommence alternativement (1) et (2) jusqu'à convergence en processus.

Cette méthode présente des inconvénients :

- elle comporte un grand nombre d'opérations à chaque itération.
- si les paramètres généraux sont particulièrement certifiés au paramètre particuliers, la convergence risque d'être lente ; ce phénomène est mis en évidence en annexe.

Nous proposons ici une méthode qui ajuste tous les paramètres à chaque itération, c'est à dire qui résout un système linéaire de P équations à P inconnues, en le ramenant à une série de systèmes de petite dimension (méthode de substitution par blocs), grâce au fait que chaque sous-ensemble de variables ne dépend que d'un petit nombre de paramètres. De cette façon la vitesse de convergence est maximale, alors que le volume de calcul n'augmente, en gros, que proportionnellement à P (pour un nombre fixé de paramètres généraux).

3. FORMALISME :

Un échantillon (indiqué par i) est un ensemble de points de mesure (t_{i1}, x_{i1}^m) , $(t_{i2}, x_{i2}^m) \dots (t_{iR}, x_{iR}^m) \dots$ sur lesquels on veut ajuster l'équation théorique

$$x_{iR}^{th} = F(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p; \beta_{i1}, \beta_{i2}, \dots; t_{iR})$$

Les α_j sont les paramètres généraux, les β_{iR} sont les paramètres particuliers à l'échantillon i. On note σ_{iR}^2 l'erreur sur x_{iR}^m , en négligeant pour l'instant d'éventuelles corrélations entre les points d'un même échantillon.

Résoudre le problème des moindres carrés sur l'ensemble des échantillons consiste à minimiser

$$\chi^2 = \sum_i \left\{ \sum_R \frac{1}{\sigma_{iR}^2} [x_{iR}^m - F(\alpha_1, \alpha_2, \dots; \beta_{i1}, \beta_{i2}, \dots; t_{iR})]^2 \right\} \quad (1)$$

par rapport à l'ensemble des paramètres α_j et β_{iR} , désignés globalement par θ_ρ . La méthode itérative classique donne, pour évaluer les accroissements $\delta\theta_\rho$ des paramètres à partir de valeurs de départ θ_ρ^0 , le système linéaire suivant :

$$\sum_m A_{\rho m} \delta\theta_m = V_\rho \quad (2)$$

$$\text{avec } \begin{cases} A_{\ell m} = \sum_i \left(\sum_{i_k} \frac{1}{\sigma_{i_k}^2} \frac{\partial F}{\partial \theta_{\ell}} \frac{\partial F}{\partial \theta_m} \right) \\ V_{\ell} = \sum_i \left[\sum_{i_k} \frac{1}{\sigma_{i_k}^2} \frac{\partial F}{\partial \theta_{\ell}} (x_{i_k}^m - F(\theta, t_{i_k})) \right] \end{cases} \quad (2)$$

Les valeurs théoriques F et les dérivées $\frac{\partial F}{\partial \theta_{\ell}}$ étant évaluées avec les valeurs θ_{ℓ}^0 des paramètres.

Le fait intéressant est ici que $\frac{\partial F}{\partial \theta_{\ell}}$ est identiquement nul si θ_{ℓ} est un paramètre particulier β_{i_k} , avec $i \neq 1$, donc que $A_{\ell m}$ est nul a priori si θ_{ℓ} et θ_m sont deux paramètres particuliers appartenant à des sous-ensembles différents.

Si on ordonne les paramètres de la façon suivante :

$$\begin{array}{ccccccc} \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_p & \beta_{11} \beta_{12} \dots \beta_{1k} \dots & \beta_{21} \beta_{22} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \text{par.gén.} & \text{1}^{\text{er}} \text{ss-ens. part.} & \text{2}^{\text{e}} \text{ss-ens. part.} & & & & \text{etc...} \end{array}$$

La matrice V a une structure par blocs très simple

$\dots \alpha_i \dots$	$\dots \beta_{1k} \dots$	$\dots \beta_{2k} \dots$	\dots	$\dots \beta_{ik} \dots$	\dots
B	C_1	C_2	\dots	C_i	\dots
C_1^t	D_1	0	$\dots 0 \dots$	0	$\dots 0 \dots$
C_2^t	0	D_2	$\dots 0 \dots$	0	$\dots 0 \dots$
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
C_i^t	0	0	$\dots 0 \dots$	D_i	$\dots 0 \dots$
\vdots	\vdots	\vdots	\dots	0	\ddots

avec

$$(B)_{jj'} = \sum_i \left(\sum_k \frac{1}{\sigma_{i,k}^2} \frac{\partial F}{\partial \alpha_j} \frac{\partial F}{\partial \alpha_{j'}} \right)$$

$$(C_i)_{jk} = \sum_k \frac{1}{\sigma_{i,k}^2} \frac{\partial F}{\partial \alpha_j} \frac{\partial F}{\partial \beta_{i,k}}$$

$$(D_i)_{kk'} = \sum_k \frac{1}{\sigma_{i,k}^2} \frac{\partial F}{\partial \beta_{i,k}} \frac{\partial F}{\partial \beta_{i,k'}}$$

De même le vecteur V pourra se décomposer en un vecteur Y à p composantes :

$$(Y)_j = \sum_i \left[\sum_k \frac{1}{\sigma_{i,k}^2} \frac{\partial F}{\partial \alpha_j} (x_{i,k}^m - F(\theta, t_{i,k})) \right]$$

et une série de vecteurs Z_i :

$$(Z_i)_k = \sum_k \frac{1}{\sigma_{i,k}^2} \frac{\partial F}{\partial \beta_{i,k}} (x_{i,k}^m - F(\theta, t_{i,k}))$$

Finalement le système global peut se décomposer en :

p équations générales portant sur tous les $\delta\theta_\ell$, notées matriciellement :

$$B \delta\alpha + \sum_i C_i \delta\beta_i = Y \quad (3)$$

une série de groupes d'équations ne portant que sur un $\delta\beta_i$ et $\delta\alpha$

$$C_i^k \delta\alpha + D_i \delta\beta_i = Z_i \quad (4)$$

Le groupe d'équations (4) permet d'exprimer les $\delta\beta_i$ en fonction des $\delta\alpha$

$$\delta \beta_i = D_i^{-1} (Z_i - C_i^t \delta \alpha) \quad (4)$$

On peut alors substituer les $\delta \beta_i$ dans (3) :

$$B \delta \alpha + \sum_i C_i D_i^{-1} (Z_i - C_i^t \delta \alpha) = Y$$

c'est à dire :

$$(B - \sum_i C_i D_i^{-1} C_i^t) \delta \alpha = Y - \sum_i C_i D_i^{-1} Z_i \quad (6)$$

Le système (6) ne comporte plus que n équations à n inconnues, $\delta \alpha_j$.

Si on a aussi besoin des $\delta \beta_i$ (en particulier pour une itération), ils s'écrivent facilement à partir des $\delta \alpha_j$ par (4).

Un peu d'algèbre supplémentaire permet de calculer A^{-1} (la matrice de covariance) et les covariances des $\delta \alpha_j$ et $\delta \beta_i$ à partir de la matrice A par :

E	F ₁	...	F _i	...
F _{1}^t}	G _{11}}	...	G _{1i}}	...
⋮	⋮		⋮	
F _{i}^t}	G _{i1}}	...	G _{ii}}	...
⋮	⋮		⋮	

Où :

$$E = (B - \sum_i C_i D_i^{-1} C_i^t)^{-1}$$

$$F_i = -E C_i D_i^{-1}$$

$$G_{i' i} = \delta_{i' i} D_i^{-1} + D_{i'}^{-1} C_{i'}^t E C_i D_i^{-1}$$

4. EXTENSIONS POSSIBLES :

4.1. Erreurs de mesure corrélées :

Si les erreurs sur les points d'un même sous-ensemble i sont corrélées, notons Σ_i la matrice covariante des x_{iR}^m , W_i son inverse (la matrice des poids). Le formalisme précédent est encore applicable, en écrivant dans (2) :

$$A_{\ell m} = \sum_i \left[\sum_{k, k'} (W_i)_{kk'} \frac{\partial F}{\partial \theta_\ell} (\theta_i^0, t_{ik}) \frac{\partial F}{\partial \theta_m} (\theta_i^0, t_{ik'}) \right]$$

$$\text{ou} \quad V_\ell = \sum_i \left[\sum_{k, k'} (W_i)_{kk'} \frac{\partial F}{\partial \theta_\ell} (\theta_i^0, t_{ik}) \cdot (x_{iR}^m - F(\theta_i^0, t_{ik})) \right]$$

Par contre s'il existe une corrélation entre x_{iR}^m et $x_{i'R}^m$ avec $i \neq i'$, les paramètres β_{iR} doivent être considérés comme connectés aux $\beta_{i'R}$.

Dans le cas où ces corrélations sont faibles, on peut résoudre le système linéaire

$$\begin{cases} B \delta \alpha + \sum_i C_i \delta \beta_i = Y & (3) \\ C_i^t \delta \alpha + D_i \delta \beta_i + \sum_{j \neq i} \varepsilon_{ij} \delta \beta_j = Z & (4) \end{cases}$$

par approximations aux ordres successifs en ε_{ij} (les matrices ε_{ij} étant considérées comme des infiniments petits par rapport aux matrices B , C_i et D_i).

À l'ordre zéro on trouve les solutions $\delta\beta_i^{(0)}$ et $\delta\alpha^{(0)}$ grâce à (5) et (6).
 À l'ordre un les corrections $\delta\alpha^{(1)}$ et $\delta\beta_i^{(1)}$ vérifient les équations

$$B \delta\alpha^{(1)} + \sum_i C_i \delta\beta_i^{(1)} = 0 \quad (3'')$$

$$C_i^k \delta\alpha^{(1)} + D_i \delta\beta_i^{(1)} + \sum_{j \neq i} E_{ij} \delta\beta_j^{(0)} = 0 \quad (4'')$$

Connaissant les $\delta\beta_i^{(0)}$, on est donc ramené à un système identique à (3), (4), où γ est remplacé par α et $\bar{\gamma}_i$ par $-\sum_{j \neq i} E_{ij} \delta\beta_j^{(0)}$.

4.2. Hiérarchie à niveaux multiples :

À l'intérieur d'un sous-ensemble de paramètres particuliers, il peut exister une sous-structure hiérarchisée.

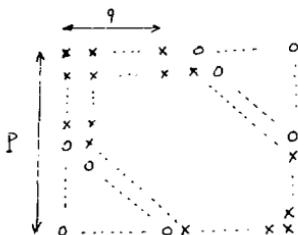
Dans l'exemple de l'austérité de vertex, cette se produit. Il existe des vertex secondaires : une trace issue d'un vertex secondaire dépend des paramètres généraux (les coordonnées du vertex principal), de paramètres semi-particuliers (l'impulsion de la particule qui se désintègre et son parcours), et de paramètres particuliers à cette trace secondaire : les composants de son impulsion au vertex secondaire.

Dans ce cas la matrice D_i possède une sous-structure par blocs analogue à celle de la grande matrice Λ décrite ci-dessus, ce qui permet de calculer D_i^{-1} plus facilement que par une méthode standard (voir la fin du § 3 pour l'expression explicite de Λ^{-1}).

On peut traiter de façon analogue toute hiérarchie de type arborescent, qui donne à la matrice A une structure géogène.

4.3. Autres configurations ayant peu de connexions entre les paramètres :

De telles configurations donnent une matrice A avec beaucoup d'éléments nuls, par laquelle il peut exister une méthode de résolution accélérée. Par exemple, si on peut ordonner les P paramètres de telle sorte qu'une variable quelconque ne dépende que de q paramètres consécutifs au plus, la matrice A n'a d'éléments non-nuls que dans une bande autour de la diagonale



La première équation permet d'exprimer le premier paramètre α_1 en fonction des $q-1$ suivants ; cette expression injectée dans la deuxième donne une équation donnant α_2 en fonction de $\alpha_3 \dots \alpha_{q+1}$, d'où on peut déduire aussi α_3 en fonction de $\alpha_3 \dots$; et ainsi de suite jusqu'à l'équation donnant α_P , à partir de quoi on peut remonter à $\alpha_{P-1} \dots \alpha_1$. Pour une valeur de q fixée, le nombre d'opérations élémentaires d'augmente, asymptotiquement, que proportionnellement à P .

De façon analogue, si une variable ne dépend que de p paramètres généraux et de q paramètres consécutifs au plus parmi les autres, on pourra ramener la résolution du système global à celle d'un système de p équations

deuxième les α paramètre géométrique.

Annexe - Convergence lente de l'ajustement alternatif

Nous illustrons maintenant sur un exemple simple un problème à deux paramètres α, β dans lequel l'ajustement alternatif converge en fixant l'autre. Si ces paramètres sont les deux paramètres d'une ellipse à centre et d'axe au voisinage de l'origine, les courbes d'ajustement alternées d'ellipses concentriques dont le grand axe est toujours dirigé vers l'axe α, β .

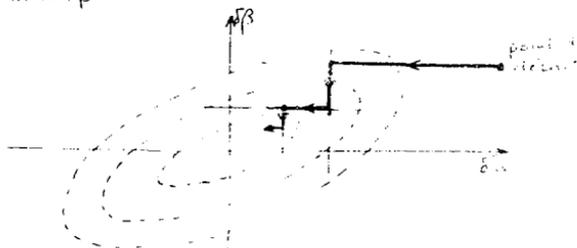


Figure 1.1. Situation de convergence d'un ajustement alternatif à deux paramètres géométriques. Les courbes d'ajustement alternées sont des ellipses concentriques dont le grand axe est toujours dirigé vers l'axe α, β . Les courbes d'ajustement alternées sont des ellipses concentriques dont le grand axe est toujours dirigé vers l'axe α, β .

Figure 1.2. Situation de convergence d'un ajustement alternatif à deux paramètres géométriques. Les courbes d'ajustement alternées sont des ellipses concentriques dont le grand axe est toujours dirigé vers l'axe α, β .

- dans l'étalonnage de signaux, si la forme est asymétrique, le paramètre τ est fortement corrélé au paramètre gouvernant cette asymétrie, s'il y en a un.

- dans l'ajustement de vertex, la pente et la courbure d'une trace *du même plan donné* sont fortement corrélées aux coordonnées correspondantes du vertex. Toutefois, dans ce cas, la première étape sera une variation des coordonnées du vertex en fixant les paramètres particuliers des traces aux valeurs déduites d'un ajustement préalable de chaque trace, et le vertex ainsi trouvé sera en général suffisamment proche de la position minimisant le χ^2 global pour qu'on puisse se dispenser d'itération.

Références :

- (1) P. Billoir. Thèse (Université Paris 6) (1983)
- (2) P. Billoir. "Fast and flexible vertex fit" (en préparation)