Régularisation de Tikhonov

J-P. CHEHAB[1]

[1]LAMFA, UMR 7352, Université de Picardie Jules Verne, Amiens, France (jean-paul.chehab@u-picardie.fr)

GDTA3, le 26 janvier 2015

La problématique

La présence d'incertitudes numériques (bruits, erreurs de mesures) peut compromettre la fiabilité de la résolution effective d'un certain nombre de problèmes, particulièrement les problèmes mal posés. On se restreint ici aux systèmes linéaires

$$Au = f \tag{1}$$

La problématique

La présence d'incertitudes numériques (bruits, erreurs de mesures) peut compromettre la fiabilité de la résolution effective d'un certain nombre de problèmes, particulièrement les problèmes mal posés. On se restreint ici aux systèmes linéaires

$$Au = f \tag{1}$$

Definition

On dit que le problème (1) est bien posé si

- il admet une solution et que cette solution est unique
- il est stable i.e. A^{-1} est continu

La problématique

La présence d'incertitudes numériques (bruits, erreurs de mesures) peut compromettre la fiabilité de la résolution effective d'un certain nombre de problèmes, particulièrement les problèmes mal posés. On se restreint ici aux systèmes linéaires

$$Au = f \tag{1}$$

Definition

On dit que le problème (1) est bien posé si

- il admet une solution et que cette solution est unique
- il est stable i.e. A^{-1} est continu

En dimension finie, dans certains cas, on peut rencontrer des difficultés importantes durant la résolution numérique donnant lieu à des résultats peu fiables (on parlera de problèmes mal conditionnés).
APPLICATIONS : défloutage, débruitage ...

Exemples Problème type : calculer au mieux $Au = g$ avec avec A mal conditionnée et g contendu bruit.

Exemples Problème type : calculer au mieux $Au = g$ avec avec A mal conditionnée et g contendu bruit.
Problème de Baart (cf Hansen) (pb intégral Fredholm de première espèce)

$$\int_0^1 K(s,t))f(t)dt = g(s) + e(s)$$

Ici f intensité source de lumière, g intensité de l'image, K noyau représentant les effets de floutage, e le bruit inconnu.

$$K(s,t) = exp(s\cos(t)),\ g(s) = \frac{2\sinh(s)}{s}$$

La solution sans bruit est donnée pour $f(t) = \sin(t)$. A est dense, $\sigma_n = 1.7170\ 10^{-18}, \sigma_1 = 3.2286$.

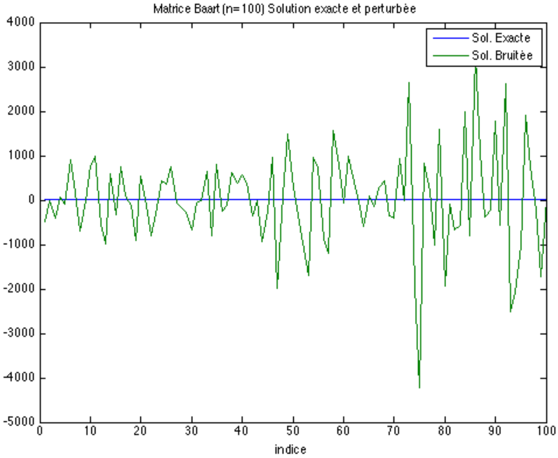

Figure : Pb Baart, $n = 100$, $e = 0.0001 * (1 - 2 * rand(n, 1))$

conditionnement

A inversible, $\| \, . \, \|$, norme matricielle, alors $\kappa(A) = \| A \| \| A^{-1} \|$.

conditionnement

A inversible, $\| \,.\, \|$, norme matricielle, alors $\kappa(A) = \| A \| \| A^{-1} \|$.
Si $Ax = b$ et $A(x + \delta x) = b + \delta b$ alors

$$\frac{| \delta x |}{| x |} \leq \kappa(A) \frac{| \delta b |}{| b |}$$

Si $\kappa(A) >> 1$ alors de petites erreurs sur le second membre peuvent entâcher la solution numérique.

Matrice de Hilbert $A_{i,j} = \dfrac{1}{i+j-1}$, $\kappa(A) \simeq exp(c\ n^2)$

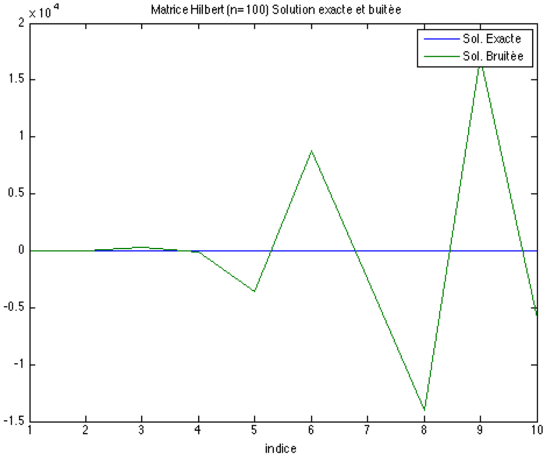

Figure : $n = 10,\ u_{ex} = 1, e = 0.001 * (1 - 2 * rand(n, 1))$

SVD : Décomposition en valeurs singulières

Soit A une matrice $m \times n$ de $\mathcal{M}m, n(\mathbb{R})$. Alors, on peut factoriser A sous la forme

$$A = U\Sigma V^*,$$

où U est unitaire $m \times m$, Σ est $m \times n$ avec coefficients diagonaux des réels positifs ou nuls tous les autres étant nuls, et V, matrice unitaire $n \times n$; V^* est l'adjointe à V.
Les coefficients diagonaux de Σ sont les valeurs singulières de A. Elles sont aussi les racines positives des valeurs propres de $A * A$.
$diag(\Sigma) = (\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$, $\sigma_i \geq \sigma_{i+1} \geq 0$

La norme 2 d'une matrice est donc σ_1, le conditionnement $\frac{\sigma_1}{\sigma_n}$ et
$rang(A) = \mathrm{Max}_r\{\sigma_r > 0\}$

Analyse du problème

Etant donné une donnée observée $g = g_{exact} + e$ où e est une erreur inconnue, résoudre

$$g_{exact} + e = Au$$

où A $n \times n$ est mal conditionnée. On a

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^T$$

Ici $r$est le rang de A. La solution (moindres carrés) sans bruit est

$$u_{exact} = A^{\dagger} g_{exact} = \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^T g_{exact}}{\sigma_i} v_i$$

Celle bruitée

$$\begin{aligned} u &= A^{\dagger}\left(g_{exact} + e\right) = \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^T g_{exact}}{\sigma_i} v_i + \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i \\ &= u_{exact} + \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i \end{aligned}$$

Question : comment réduire le terme d'erreur avec e inconnu ?

Méthode de Tikhonov

Idée : introduire $\alpha \geq 0$ et construire

$$u_\alpha = \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha} \frac{u_i^T g}{\sigma_i} v_i \qquad \text{(élimine le pb des divisions par 0 ! !)}$$

α est le paramètre de régularisation.

Méthode de Tikhonov

Idée : introduire $\alpha \geq 0$ et construire

$$u_\alpha = \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha} \frac{u_i^T g}{\sigma_i} v_i \qquad \text{(élimine le pb des divisions par 0 ! !)}$$

α est le paramètre de régularisation.Il est facile de voir que u_α est solution du problème de minimisation (Tikhonov, Arsenin (1977))

$$\underset{u}{\mathrm{Min}} \left(\| Au - g \|^2 + \alpha \| u \|^2 \right)$$

Méthode de Tikhonov

Idée : introduire $\alpha \geq 0$ et construire

$$u_\alpha = \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha} \frac{u_i^T g}{\sigma_i} v_i \qquad \text{(élimine le pb des divisions par 0 ! !)}$$

α est le paramètre de régularisation.Il est facile de voir que u_α est solution du problème de minimisation (Tikhonov, Arsenin (1977))

$$\operatorname*{Min}_u \left(\| Au - g \|^2 + \alpha \| u \|^2 \right)$$

caractérisé par (relation optimalité du premier ordre)

$$\left(A^T A + \alpha Id \right) u = A^T g$$

Méthode de Tikhonov

Idée : introduire $\alpha \geq 0$ et construire

$$u_\alpha = \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha} \frac{u_i^T g}{\sigma_i} v_i \qquad \text{(élimine le pb des divisions par 0 ! !)}$$

α est le paramètre de régularisation.Il est facile de voir que u_α est solution du problème de minimisation (Tikhonov, Arsenin (1977))

$$\operatorname*{Min}_u \left(\| Au - g \|^2 + \alpha \| u \|^2 \right)$$

caractérisé par (relation optimalité du premier ordre)

$$\left(A^T A + \alpha Id \right) u = A^T g$$

REMARQUE 1 : u est la solution de $\begin{pmatrix} A \\ \sqrt{\alpha} Id \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g \\ 0 \end{pmatrix}$ au sens des moindres carrés.

Méthode de Tikhonov

Idée : introduire $\alpha \geq 0$ et construire

$$u_\alpha = \sum_{i=1}^{r} \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha} \frac{u_i^T g}{\sigma_i} v_i \qquad \text{(élimine le pb des divisions par 0 ! !)}$$

α est le paramètre de régularisation.Il est facile de voir que u_α est solution du problème de minimisation (Tikhonov, Arsenin (1977))

$$\operatorname*{Min}_{u} \left(\| Au - g \|^2 + \alpha \| u \|^2 \right)$$

caractérisé par (relation optimalité du premier ordre)

$$\left(A^T A + \alpha Id \right) u = A^T g$$

REMARQUE 1 : u est la solution de $\begin{pmatrix} A \\ \sqrt{\alpha} Id \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g \\ 0 \end{pmatrix}$ au sens des moindres carrés.

REMARQUE 2 : on considère plus généralement la fonction coût

$$\| Au - g \|^2 + \alpha \| Hu \|^2$$

avec H de rang maximal (cf débruitage).

Erreur de perturbation et de régularisation

Ici Ψ est un opérateur linéaire (dépendant de α) à construire pour réduire l'erreur.

$$
\begin{aligned}
u_\alpha &= V\Psi\Sigma^{-1}U^T g, \;\; g = g_{exact} + e \\
u_\alpha &= V\Psi\Sigma^{-1}U^T g_{exact} + V\Psi\Sigma^{-1}U^T g \\
&= V\Psi\Sigma^{-1}U^T U\Sigma V^T u_{exact} + V\Psi\Sigma^{-1}U^T g \\
&= V\Psi V^T u_{exact} + V\Psi\Sigma^{-1}U^T g
\end{aligned}
$$

Erreur de perturbation et de régularisation

Ici Ψ est un opérateur linéaire (dépendant de α) à construire pour réduire l'erreur.

$$\begin{aligned}
u_\alpha &= V\Psi\Sigma^{-1}U^T g, \;\; g = g_{exact} + e \\
u_\alpha &= V\Psi\Sigma^{-1}U^T g_{exact} + V\Psi\Sigma^{-1}U^T g \\
&= V\Psi\Sigma^{-1}U^T U\Sigma V^T u_{exact} + V\Psi\Sigma^{-1}U^T g \\
&= V\Psi V^T u_{exact} + V\Psi\Sigma^{-1}U^T g
\end{aligned}$$

Du coup

$$u_{exact} - u_\alpha = \underbrace{(Id - V\Psi V^T)u_{exact}}_{Err.Rgul.} \quad \underbrace{-V\Psi\Sigma^{-1}U^T g}_{Err.perturb.}$$

- Si $\Psi \simeq Id$, l'erreur de régularisation est petite mais cellede perturbation (bruit) devient importante. La solution est sous-régularisée et $V\Psi V^T \simeq Id$.
- Si $\psi \simeq 0$, alors l'erreur de perturbation est amortie mais on perd beaucoup de données du signal d'origine.
- Il faut donc choisir Ψ de sorte à équilibrer les deux type d'erreurs.

Bien sûr $\Psi = \Psi(\alpha)$, $\Psi(0) = Id$.

Méthode de Tikhonov : choix de α

On remarque que

- Si α est petit, la solution est contaminée par les perturbations extérieures
- si $\alpha >> 1$ alors la solution approche mal celle du problème de départ

Méthode de Tikhonov : choix de α

On remarque que

- Si α est petit, la solution est contaminée par les perturbations extérieures
- si $\alpha >> 1$ alors la solution approche mal celle du problème de départ

Il faut donc trouver des heuristiques pour déterminer une valeur "optimale" de α

Choix de α : Heuristiques

- Principe de Morozov
  Trouver α tel que

$$\| g - A(A^T A + \alpha Id)^{-1} A^T g \| = \| e \|$$

- Méthode de Gfrere/Raus

$$\alpha^3 gT(AA^T + \alpha Id)^{-3} g = \| e \| 2$$

- Critère de quasi-optimalité

$$Min \left\{ \alpha^2 g^T A(A^T A + \alpha Id)^{-4} A^T g \right\}$$

Il faut évidemment connaître $\| e \|$ pour les deux premiers critères

Generalized Cross-Validation (GcV) Golub, 1979

On considère le cas général $An \times m$ et la fonctionnelle

$$\operatorname*{Min}_{u} \left(\| Au - g \|^2 + m\alpha \| u \|^2 \right)$$

L'estimation GcV du paramètre optimal minimise

$$G(\alpha) = \frac{\frac{1}{m} \| (Id - A(A^T A + \alpha m Id)^{-1} A^T) g \|^2}{\frac{1}{m} trace((Id - A(A^T A + \alpha m Id)^{-1} A^)}$$

Generalized Cross-Validation (GcV) Golub, 1979

On considère le cas général $An \times m$ et la fonctionnelle

$$\operatorname*{Min}_{u} \left(\| Au - g \|^2 + m\alpha \| u \|^2 \right)$$

L'estimation GcV du paramètre optimal minimise

$$G(\alpha) = \frac{\frac{1}{m} \| (Id - A(A^T A + \alpha m Id)^{-1} A^T) g \|^2}{\frac{1}{m} trace((Id - A(A^T A + \alpha m Id)^{-1} A^)}$$

REMARQUE : la trace peut s'estimer par des méthodes de Montecarlo (Cf Golub Bai)

$$trace(A) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} < z_i, Az_i >$$

avec $(z_i)_j = \pm 1$ (pile ou face)

L-curve : estimation du paramètre optimal

Si $m \geq n$ et si la SVD de A est connue, alors

$$G(\beta) = \frac{m\left(\sum_{i=1}^{r} g_i^2 \left(\frac{\beta}{\sigma_i^2 + \beta}\right)^2 + \sum_{i=r+1}^{m} g_i^2\right)}{m - n + \sum_{i=1}^{r} \frac{\beta}{\sigma_i^2 + \beta}}$$

avec $\beta = m\alpha$.

L-curve

- Le graphe en échelle log–log de la courbe $(\| g - Au_\alpha \|, \| u_\alpha \|)$ obtenue en faisant varier $\alpha \in [0, +\infty[$
- Dans la plupart des cas cette courbe a une forme de "L"
- Lawson et Hanson ont proposé de choisir α correspondant au "coin" de la courbe en "L" (Le point de courbature maximale, voir Hansen ; Hansen et O'Leary)

Il faut donc considérer les quantités

$$\| u_\alpha \|^2 = g^T A \left(A^T A + \alpha Id\right)^{-2} A^T g$$

et

$$\begin{aligned} \| Au_\alpha - g \|^2 &= g^T g + g^T A \left(A^T A + \alpha Id\right)^{-1} A^T A \left(A^T A + \alpha Id\right)^{-1} A^T g \\ &\quad -2 g^T A \left(A^T A + \alpha Id\right)^{-1} A^T g \end{aligned}$$

Matrice de Hilbert $A_{i,j} = \dfrac{1}{i+j-1}$

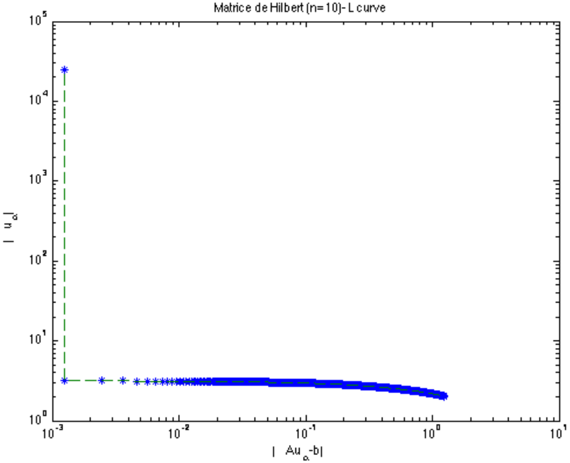

Figure : L-Curve $n = 10$, $u_{ex} = 1, e = 0.001 * (1 - 2 * rand(n, 1))$

Matrice de Baart

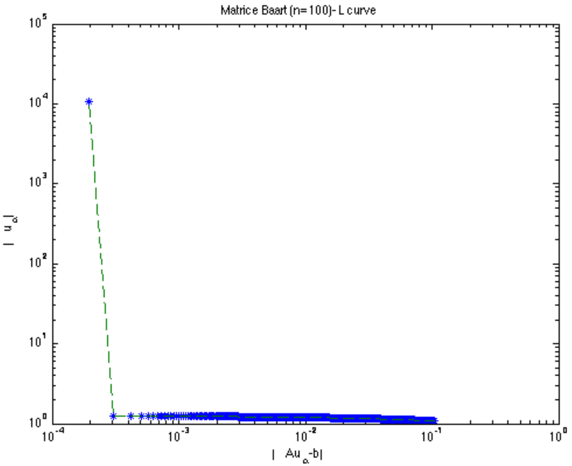

Figure : L-Curve $n = 100$, $e = 0.0001 * (1 - 2 * rand(n, 1))$

Débruitage

On effectue la mesure de n données $\tilde{y}_i$ bruitée (petites perturbations à hautes fréquences), on mesure donc

$$\tilde{y}_i = y_i + \delta_i \text{ au lieu de } y_i, i = 1, \cdots, n.$$

Pour estimer y_i, on minimise la fonctionnelle

$$\begin{aligned} \Phi_\lambda(x) = \quad & \| x - y \|_n^2 \quad + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)^2 \\ = & \| x - y \|_n^2 \quad + \lambda \| Dx \|_m^2 \end{aligned}$$

avec $D : n \times (n-1)$, $(Dx)_i = x_{i+1} - x_i$. En gros la fonctionnelle prend en compte la minimisation des sauts (les hautes fréquences), ce qui a pour effet de lisser (régulariser) le signal.

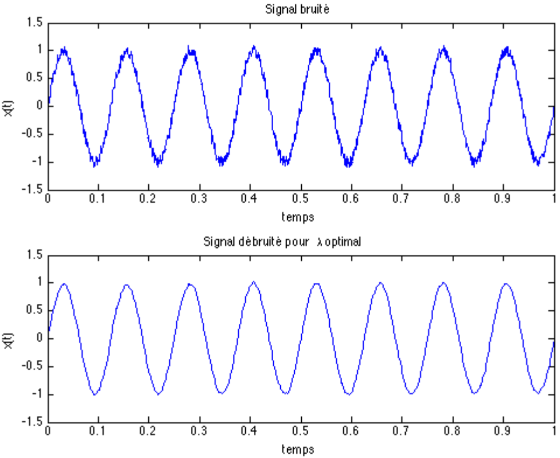

Figure : $y_i = \sin(16\pi \frac{i}{N+1}), i = 1, \cdots, N$

Pb de Baart

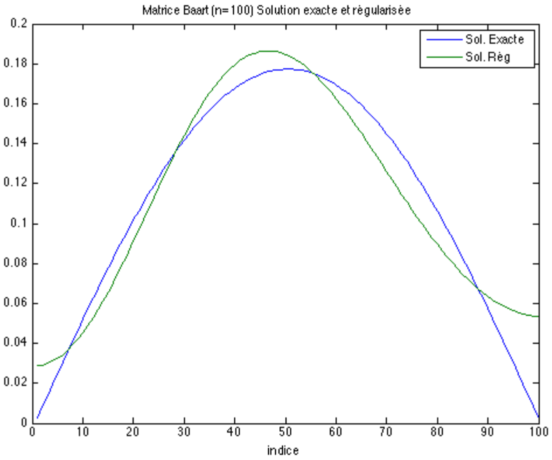

Figure : Pb Baart, $n = 100$, $e = 0.0001 * (1 - 2 * rand(n, 1))$

Matrice de Hilbert

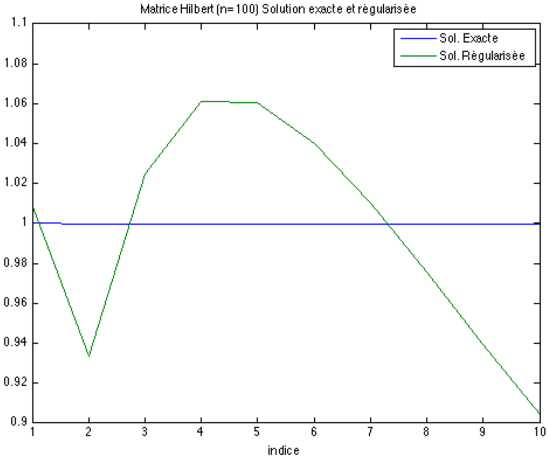

Figure : Matrice de Hilbert, $n = 10$, $e = 0.001 * (1 - 2 * rand(n, 1))$

Thématique importante

Sujet très actif, à l'interface de l'agèbre linéaire numérique, des statistiques, importance des applications avec problèmes inverses, le traitement d'images
359 articles (MathSciNet) avec "Tikhonov regularization" dans le titre depuis 1978, 1265 articles (au moins) portant sur le sujet

Thématique importante

Sujet très actif, à l'interface de l'agèbre linéaire numérique, des statistiques, importance des applications avec problèmes inverses, le traitement d'images 359 articles (MathSciNet) avec "Tikhonov regularization" dans le titre depuis 1978, 1265 articles (au moins) portant sur le sujet

Autres techniques de régularisation

- SVD Tronquée (TSVD) (Hansen, 1987)

  Remplacer A par $\tilde{A} = U_p \Sigma_p V_p^* = \sum_{i=1}^{p} U_i \sigma_i V_i^*$, $p << m$ et résoudre formellement le problème
- Filtres (constructions de Ψ)
- Extrapolation (Brezinski *et al*, 1998)
  Idée : calculer u_α pour différentes valeurs de α, interpoler ces valeurs par un vecteur sur une formule TSVD de la solution, puis extrapoler à $\alpha = 0$.
  Applications efficaces avec la matrice de Hilbert

Thématique importante

Sujet très actif, à l'interface de l'agèbre linéaire numérique, des statistiques, importance des applications avec problèmes inverses, le traitement d'images
359 articles (MathSciNet) avec "Tikhonov regularization" dans le titre depuis 1978, 1265 articles (au moins) portant sur le sujet

Autres techniques de régularisation

- SVD Tronquée (TSVD) (Hansen, 1987)

  Remplacer A par $\tilde{A} = U_p \Sigma_p V_p^* = \sum_{i=1}^{p} U_i \sigma_i V_i^*$, $p << m$ et résoudre formellement le problème
- Filtres (constructions de Ψ)
- Extrapolation (Brezinski *et al*, 1998)
  Idée : calculer u_α pour différentes valeurs de α, interpoler ces valeurs par un vecteur sur une formule TSVD de la solution, puis extrapoler à $\alpha = 0$.
  Applications efficaces avec la matrice de Hilbert

Voir la toolbox Matlab développée par Hansel (1994)

- C. Brezinski, M. Redivo Zaglia, G. Rodriguez, S. Seatzu Extrapolation techniques for illâconditioned linear systems Numer. Math., 81 (1998) 1–29.
- Zhaojun Bai, Mark Fahey, Gene Golub, Some large-scale matrix computation problems, Journal of Computational and Applied Mathematics 74 (1996) 71-89
- G.H. Golub, M. Heath and G. Wahba, Generalized cross-validation as a method to choosing a good ridge parameter, Technometrics, v 21 n 2, (1979), pp 215-223
- P.C. Hansen, The truncated SVD as a method for regularization. BIT 27 (1987), no. 4, 534–553.
- P.C. Hansen, Regularization tools : a Matlab package for analysis and solution of discrete illâposed problems, Numer. Algo., v 6, (1994), pp 1–35
- P.C. Hansen and D.P. O'Leary, The use of the L-curve in the regularization of discrete ill–posed problems, SIAM J. Sci. Comput., v 14, (1993), pp 1487–1503
- A.N. Tikhonov et V.Y. Arsenin, Solutions of ill–posed problems, (1977), Wyley