

PROTECTION DE LA REGRESSION

par P. CAZES

1. INTRODUCTION.

En régression on cherche à expliquer une variable (le rendement d'une culture par exemple) en fonction d'un certain nombre de variables explicatives (telles que certaines caractéristiques du sol dans le cas du rendement d'une culture).

Si le nombre des variables explicatives est grand par rapport au nombre d'observations, ou si ces variables explicatives sont très corrélées, la régression est de mauvaise qualité: coefficients de régression élevés, dépendant fortement de l'échantillonnage: on est dans le cas où pour expliquer une valeur y_i observée, on a une somme d'effets (grands en valeur absolue par rapport à y_i) de sens contraire, et donc se retranchant; la reconstitution de y_i est alors illusoire.

Pour protéger la regression, on peut:

— soit faire une régression pas à pas (i.e. introduire les variables une par une en fonction de leur importance);

— soit imposer des contraintes (i.e. minimiser la somme des moindres carrés sous certaines conditions).

Dans le cas de la régression sous contraintes, trois types de contraintes nous sont apparues intéressantes:

1) contraintes sur les coefficients de régression auxquels on impose, pour avoir un sens, d'être positifs (cas que l'on rencontre fréquemment en pratique), ou d'être compris entre deux valeurs données;

2) contraintes sur la longueur du vecteur de régression auquel on impose d'être plus petit qu'une valeur donnée (ridge regression);

3) contraintes sur la variance résiduelle de la régression à laquelle on impose d'être supérieure à la variance d'erreur (cas de variables entachées d'erreurs.)

L'application des méthodes précédentes a donné d'excellents résultats lorsque la méthode des moindres carrés donnait des résultats aberrants.

2. ETUDE MATHEMATIQUE DE LA REGRESSION SOUS CONTRAINTES.

2.1. FORMALISATION MATHEMATIQUE ET INTERPRETATION GEOMETRIQUE DANS R^n .

Le problème de la régression sous contraintes peut se formaliser ainsi: étant donnée une variable à expliquer y et p variables explicatives x_1, \dots, x_p dont on possède un n échantillon $\{y^j, x_1^j, \dots, x_p^j | j = 1, n\}$, trouver le vecteur \mathbf{b} de $E = (R^p)^*$ de composantes b^i ($1 \leq i \leq p$) telles que:

$$\sum \{(y^j - \sum \{b^i x_i^j | i = 1, p\})^2 | j = 1, n\}$$

soit minimum sous la condition: $\mathbf{b} \in C$ où C désigne la partie de l'espace $E = (R^p)^*$ où sont vérifiées les contraintes que l'on a imposées.

Dans les cas que nous examinerons, C sera:

— soit une partie de E délimitée par une série de sous espaces vectoriels (ou affines) (cas de contraintes linéaires), dans ce cas C est un convexe fermé;

— soit une partie de E délimitée par une surface du second degré (cas de contraintes quadratiques); dans ce dernier cas, C est soit un convexe fermé, soit le complémentaire d'un convexe ouvert (extérieur d'un ellipsoïde), soit la réunion de deux convexes fermés (cas d'une surface ayant deux branches infinies, les contraintes imposées étant vérifiées à l'intérieur de chaque branche).

Si l'on désigne par \mathbf{y} le vecteur de $F = R^n$ de composantes

$$\{y^j | j = 1, n\} \quad \text{et par } \mathbf{x}_i \text{ (} 1 \leq i \leq p \text{)}$$

le vecteur de R^n de composantes $\{x_i^j | j = 1, n\}$, et si l'on pose:

$$X'_{(n,p)} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_p)$$

(X' est l'application de $E = (R^p)^*$ dans $F = R^n$, qui à $\mathbf{b} \in E$ associe $\mathbf{z} = X'\mathbf{b} = \sum b^i \mathbf{x}_i \in F$), on recherchera de façon plus générale, R^n étant muni de la métrique N la combinaison linéaire

$$\mathbf{z} = \sum \{b^i \mathbf{x}_i | i = 1, p\} = X'\mathbf{b} \quad \text{telle que } \mathbf{y} - \mathbf{z}$$

soit de norme minimale, i.e. telle que:

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{z}\|_N^2 = N(\mathbf{y} - \mathbf{z}, \mathbf{y} - \mathbf{z}) = N(\mathbf{y} - X'\mathbf{b}, \mathbf{y} - X'\mathbf{b})$$

soit minimum, sachant que $\mathbf{b} \in C$.

Ceci revient encore si l'on pose:

$$D = X'(C) = \{u \in R^n : u = X'b; b \in C\}$$

à rechercher z tel que: $\|y - z\|_N^2$ soit minimum avec $z \in D$.

z est donc la projection de y sur D , projection qui est unique si D est un convexe fermé, ce qui est réalisé si C est un convexe fermé.

Si D n'est pas convexe, et si D est délimité par une surface du second degré, la projection de y sur D peut ne pas être unique (cf. fig. 1); ce cas ne présentant avec une probabilité nulle, nous l'écartérons.

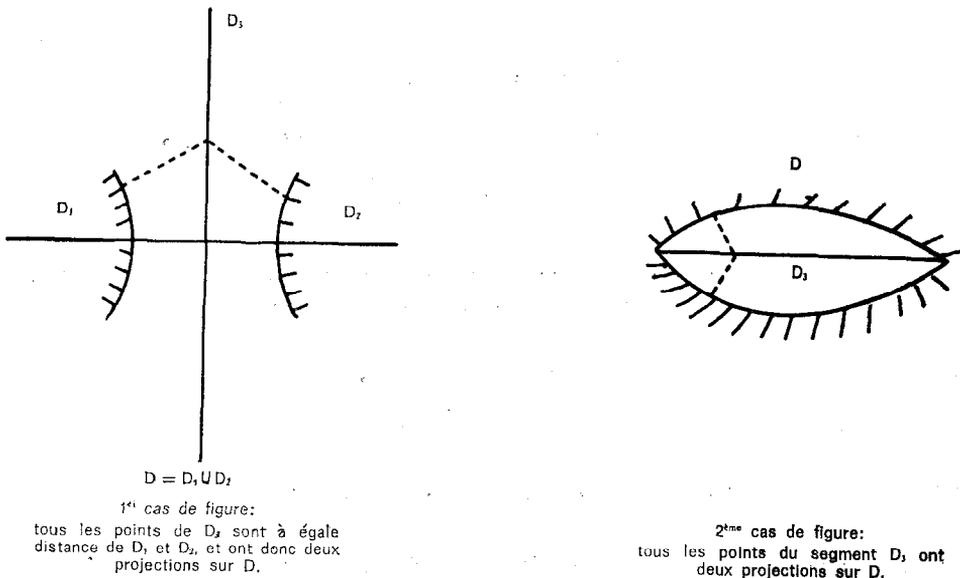


Figure 1

Nous supposons donc que la projection de y sur D est unique, et nous désignerons par $t^+ = X'b^+$ cette projection.

Nous supposons de plus que les vecteurs x_1, \dots, x_p sont linéairement indépendants, i.e. qu'ils forment une base du sous espace H de F qu'ils engendrent, à tout point

$$z = X'b = \sum \{b^i x_i | i = 1, p\} \quad \text{de } H$$

correspond donc un seul système de coordonnées $b = \{b^i | i = 1, p\}$.

2.2. SOLUTION. LIEN AVEC LA SOLUTION DES MOINDRES CARRÉS CLASSIQUE (cf. fig. 2).



$$R^2 = \|t^*\|^2 / \|y\|^2$$

$$S^2 = \|y - t^*\|^2 / \|y\|^2$$

1^{er} cas de figure

2^{ème} cas de figure

Figure 2.

Soit \hat{b} la solution classique des moindres carrés; $t = X'\hat{b}$ est la projection orthogonale (au sens de N) de y sur le sous espace H :

$$(1) \quad \hat{b} = (XNX')^{-1} XNy.$$

On a alors:

$$(2) \quad \forall u \in D \quad \|y - u\|^2 = \|y - t\|^2 + \|t - u\|^2$$

et minimiser $\|y - u\|^2$ quand u décrit D est équivalent à minimiser $\|t - u\|^2$, u appartenant à D .

Deux cas se présentent alors:

1) ou $\hat{b} \in C$, i.e. $t \in D$;

auquel cas la solution des moindres carrés vérifiant les contraintes convient: $t^+ = t$; $b^+ = \hat{b}$;

2) ou $\hat{b} \notin C$; i.e. $t \notin D$.

Dans ce cas la solution b^+ des moindres carrés sous contraintes est telle que:

$$b^+ \in \partial C$$

ou

$$t^+ = X'b^+ \in \partial D$$

δC (resp. δD) désignant la frontière de C (resp. D); en effet, si ce n'était pas le cas, \mathbf{t}^+ appartiendrait à l'intérieur $\overset{\circ}{D}$ de D , et la droite joignant \mathbf{t} à \mathbf{t}^+ couperait δD en un point \mathbf{u} plus proche de \mathbf{t} (et donc de \mathbf{y} , d'après (2)) que \mathbf{t}^+ .

On projetera donc dans ce cas \mathbf{t} sur δD .

2.3. CRITERE DE QUALITE DE LA REGRESSION.

La qualité de l'approximation de \mathbf{y} par \mathbf{t}^+ sera mesurée par le rapport

$$(3) \quad R^2 = \|\mathbf{t}^+\|_N^2 / \|\mathbf{y}\|_N^2$$

rapport qui n'est autre, si les variables $\mathbf{y}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$ sont de moyenne nulle, et si $\mathbf{t}^+ = \mathbf{t} \in D$ (i.e. si la solution classique des moindres carrés vérifie les contraintes imposées), que le carré du coefficient de corrélation multiple de \mathbf{y} par rapport à $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$.

Nous désignerons par résidu, le rapport

$$S^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{t}^+\|_N^2 / \|\mathbf{y}\|_N^2$$

rapport qui est toujours plus petit ou égal à 1 si D (ou C) contient l'origine. Si $\mathbf{t} = \mathbf{t}^+$, de la relation

$$(4) \quad \begin{aligned} \|\mathbf{y}\|^2 &= \|\mathbf{y} - \mathbf{t}\|^2 + \|\mathbf{t}\|^2 \\ &= \|\mathbf{y} - \mathbf{t}^+\|^2 + \|\mathbf{t}^+\|^2 \end{aligned}$$

l'on tire

$$(5) \quad R^2 + S^2 = 1.$$

De façon générale, de la relation :

$$(6) \quad \|\mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{t}^+\|^2 + \|\mathbf{t}^+\|^2 + 2\langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{t}^+ \rangle$$

l'on tire

$$(7) \quad R^2 + S^2 = 1 - \frac{2\langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{t}^+ \rangle}{\|\mathbf{y}\|^2}$$

Dans le cas où D (ou C) est un convexe fermé contenant l'origine, on a

$$(8) \quad \langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{t}^+ \rangle > 0$$

et donc

$$R^2 + S^2 < 1.$$

La relation (8) est un cas particulier de la relation plus générale suivante :

$$(9) \quad \forall \mathbf{z} \in D: \quad \langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{t}^+ - \mathbf{z} \rangle \geq 0.$$

En effet, supposons que (9) soit fausse :

$$(10) \quad \exists \mathbf{z} \in D: \quad \langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{t}^+ - \mathbf{z} \rangle < 0.$$

Posant

$$\mathbf{z}_1 = (1 - \lambda)\mathbf{t}^+ + \lambda\mathbf{z} = \mathbf{t}^+ + \lambda(\mathbf{z} - \mathbf{t}^+) \in D$$

avec $0 \leq \lambda \leq 1$.

On a

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{z}_1\|^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{t}^+\|^2 + \lambda^2\|\mathbf{z} - \mathbf{t}^+\|^2 - 2\lambda\langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{z} - \mathbf{t}^+ \rangle$$

expression qui en vertu de (10) est pour

$$0 < \lambda < \frac{2\langle \mathbf{y} - \mathbf{t}^+, \mathbf{z} - \mathbf{t}^+ \rangle}{\|\mathbf{z} - \mathbf{t}^+\|^2}$$

plus petite que $\|\mathbf{y} - \mathbf{t}^+\|^2$, ce qui est impossible puisque $\mathbf{z}_1 \in D$ ne peut être plus proche de \mathbf{y} que \mathbf{t}^+ .

2.4. ETUDE DANS $E = (R^p)^*$.

Le vecteur \mathbf{b} de E que l'on recherche doit minimiser

$$(11) \quad Q(\mathbf{b}) = N(\mathbf{y} - X'\mathbf{b}, \mathbf{y} - X'\mathbf{b}) = \|\mathbf{y} - X'\mathbf{b}\|_N^2$$

avec

$$(12) \quad \mathbf{b} \in C$$

$\hat{\mathbf{b}}$ désignant toujours la solution des moindres carrés, on a :

$$(13) \quad \begin{cases} Q(\mathbf{b}) = \|\mathbf{y} - X'\mathbf{b}\|_N^2 = \|\mathbf{y} - X'\hat{\mathbf{b}}\|_N^2 + \|X'(\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}})\|_N^2 \\ \quad = Q_0 + \|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2 \end{cases}$$

où $Q_0 = \|\mathbf{y} - X'\hat{\mathbf{b}}\|_N^2$ est indépendant de \mathbf{b} .

Minimiser (11) sous la contrainte $\mathbf{b} \in C$ est donc équivalent à minimiser

$$(14) \quad \begin{cases} Q_1(\mathbf{b}) = \|\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2 \\ \text{avec } \mathbf{b} \in C. \end{cases}$$

La solution \mathbf{b}^+ est donc, si l'on munit E de la métrique $M = XNX'$ (qui est bien d'après les hypothèses faites une forme quadratique définie positive) la projection de \mathbf{b} sur C .

Si $\hat{\mathbf{b}} \in C$, $\mathbf{b}^+ = \hat{\mathbf{b}}$ et $\mathcal{Q}_1(\mathbf{b}^+) = 0$.

Si $\hat{\mathbf{b}} \notin C$, $\mathbf{b}^+ \in \delta C$; dans ce cas \mathbf{b}^+ est la projection de $\hat{\mathbf{b}}$ sur δC .

Dans ce dernier cas, pour rechercher \mathbf{b}^+ , on pourra utiliser un algorithme itératif qui à partir d'un point initial $\mathbf{b}_0 \in C$ (en fait on choisira $\mathbf{b}_0 \in \delta C$, puisque $\hat{\mathbf{b}} \notin C$, $\mathbf{b}^+ \in \delta C$) converge vers \mathbf{b}^+ .

3. CAS DE CONTRAINTES LINEAIRES.

Nous supposons pour simplifier que les coefficients de regression doivent être positifs :

$$(15) \quad C = \{\mathbf{b} \in E : \forall i \in [1, p] : b_i \geq 0\}$$

C est donc le cône positif de E , délimité par l'ensemble des sous-espaces vectoriels où une ou plusieurs coordonnées sont nulles.

De même D est cône positif de H , quand on prend $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p$ comme base dans H .

D contenant l'origine, et étant délimité par une série de sous-espaces vectoriels, le théorème de PYTHAGORE reste valable :

$$(4) \quad \|\mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{t}^+\|^2 + \|\mathbf{y} - \mathbf{t}^+\|^2$$

ou encore

$$(5) \quad R^2 + S^2 = 1.$$

En effet si $\mathbf{t}^+ = \mathbf{t}$, (4) est vérifié, tandis que si $\mathbf{t}^+ \neq \mathbf{t}$, comme $\mathbf{t} \in \delta D$, si H^+ désigne la face (le sous espace vectoriel) où se trouve \mathbf{t}^+ , \mathbf{t}^+ est la projection de \mathbf{y} sur H^+ .

Du point de vue algorithme, désirant minimiser

$$\mathcal{Q}(\mathbf{b}) = \|\mathbf{y} - X'\mathbf{b}\|_Y^2 \quad (*)$$

si $\hat{\mathbf{b}} \notin C$, i.e. si un au moins des coefficient de régression classique est négatif, on emploiera la procédure itérative suivante pour minimiser \mathcal{Q} , procédure qui

(*) Il semble plus précis, d'un point de vue pratique de minimiser $\mathcal{Q}(\mathbf{b})$ plutôt que $\mathcal{Q}_1(\mathbf{b}) = \|X'(\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{b})\|_Y^2 = \|\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{b}\|_{M=XNX'}^2$

à l'itération $t + 1$ s'écrit, (sachant que $\mathbf{b}_t \in C$ en fait $\mathbf{b}_t \in \delta C$)

$$(16) \quad \mathbf{b}_{t+1} = \mathbf{b}_t + \theta d\mathbf{b}$$

θ étant déterminé de telle sorte que dans la direction $d\mathbf{b}$ considérée, il minimise $Q(\mathbf{b}_{t+1}) = \varphi(\theta)$, sous la contrainte $\mathbf{b}_{t+1} \in C$ (en fait $\mathbf{b}_{t+1} \in \delta C$). On est donc ramené à minimiser :

$$(17) \quad \begin{aligned} \varphi(\theta) &= \|\mathbf{y} - X'(\mathbf{b}_t + \theta d\mathbf{b})\|_N^2 = \|\mathbf{y} - X'\mathbf{b}_t - \theta X'd\mathbf{b}\|_N^2 \\ &= \|\mathbf{y} - X'\mathbf{b}_t\|_N^2 - 2\theta \langle \mathbf{y} - X'\mathbf{b}_t, X'd\mathbf{b} \rangle_N + \theta^2 \|X'd\mathbf{b}\|_N^2 \end{aligned}$$

avec

$$(18) \quad \forall i \in [1, p] \quad b_t^i + \theta db^i \geq 0.$$

L'ensemble des contraintes (18), vérifié pour $\theta = 0$ ($\mathbf{b}_t \in C$) est équivalent à :

$$\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$$

l'intervalle (θ_1, θ_2) contenant l'origine.

$\varphi(\theta)$ étant un trinôme du second degré dont le terme en θ^2 est strictement positif, il existe une seule valeur θ_0 de θ minimisant $\varphi(\theta)$ sous la contrainte $\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$.

Plusieurs directions de déplacement sont possibles.

Nous avons choisi comme direction de déplacement celle qui est employée dans la méthode de D'ESOP, méthode qui s'est révélé satisfaisante, d'un point de vue numérique pour le type de contraintes envisagées ici (coefficients de régression positifs). Dans cette méthode on se déplace successivement parallèlement à chaque axe de coordonnées de E .

On a donc, à l'itération $t + 1$:

$$\begin{aligned} b_{t+1}^i &= b_t^i + \theta \delta_t^i = b_t^i + \theta & \text{si } i = t \\ &= b_t^i & \text{si } i \neq t \end{aligned}$$

l'intervalle (θ_1, θ_2) n'étant autre ici que $(-b_t^i, +\infty)$.

Quand on a fait p itération (une boucle) à partir de \mathbf{b}_1 , on recommence le processus avec comme nouveau point de départ

$$\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_{p+1}.$$

Si $\mathbf{b}_{p+1} = \mathbf{b}_1$, alors on atteint l'optimum.

Si l'on désigne par Q_i la valeur de Q à la i -ème boucle, la suite Q_i étant décroissante et bornée par O est convergente, l'algorithme est donc convergent.

4. CAS DE CONTRAINTES NON LINEAIRES.

4.1. LA RIDGE REGRESSION.

Dans la ridge régression, on impose au vecteur de régression d'avoir une norme pas trop élevée de façon à éviter que la reconstitution de la variable y à expliquer se fasse à l'aide de termes de valeurs élevées, qui se retranchant donnent une reconstitution illusoire de y .

De façon plus précise, si E est muni de la métrique M_1 on impose donc que

$$(19) \quad \|b\|_{M_1}^2 \leq a^2.$$

Si la solution \hat{b} des moindres carrés vérifie (19), la solution est acceptable, sinon la solution minimisant $Q(b)$ (ou $Q_1(b)$) sous la contrainte (19) sera telle que:

$$(20) \quad \|b\|_{M_1}^2 = a^2.$$

Employant le multiplicateur de Lagrange k , on devra donc minimiser

$$(21) \quad Q_1(b) + k(\|b\|_{M_1}^2 - a^2) = \|b - \hat{b}\|_M^2 + k(\|b\|_{M_1}^2 - a^2)$$

d'où l'on déduit par dérivation matricielle

$$M(b - \hat{b}) + kM_1 b = 0 \quad \text{pour } b = b^+$$

soit

$$(M + kM_1)b = M\hat{b}$$

ou

$$(22) \quad (XNX' + kM_1)b^+ = XNX'\hat{b} = XNy.$$

La solution b^+ est donc donnée par:

$$(23) \quad b^+ = (XNX' + kM_1)^{-1} XNy$$

k étant déterminé de telle sorte que

$$(24) \quad \|b^+\|_{M_1}^2 = a^2.$$

Posons

$$(25) \quad \mathbf{b}_k = (XNX' + kM_1)^{-1} XNy$$

$$(26) \quad f(k) = \|\mathbf{b}_k\|_{M_1}^2.$$

On montre (cf. annexe 1) qu'au voisinage de $k = 0$ et pour $k \geq 0$, $f(k)$ est une fonction décroissante de k , et que le minimum de (21) sous la contrainte $f(k) = a^2$ (sachant que $f(0) = \|\hat{\mathbf{b}}\|_M^2 > a^2$) est atteint pour une valeur positive de k .

La recherche de k , tel que $f(k) = a^2$ étant assez complexe, car elle exige la diagonalisation de $XNX' M_1^{-1}$, il semble plus pratique pour déterminer \mathbf{b}^+ d'employer un processus itératif en appliquant la formule (25) pour diverses valeurs de k , et en comparant pour chaque valeur de k la norme du vecteur \mathbf{b}_k ainsi obtenu à a .

Cette façon de procéder est également intéressante si on ne sait pas a priori quelle limitation donner à $\|\mathbf{b}^+\|$; on appliquera alors la formule (25) pour $k = 0; 0,1; 0,2; \dots$; et l'on s'arrêtera quand tous les coefficients de régression se seront stabilisés.

Du point de vue de la métrique M_1 , il semble logique, soit de prendre la métrique unité (cas usuel que l'on rencontre dans la littérature), soit la métrique diagonale ayant mêmes éléments diagonaux que XNX' .

4.2. REGRESSION SUR VARIABLES ENTACHEES D'ERREURS.

4.2.1. Introduction.

On suppose ici que du fait des conditions d'observation, chaque variable observée (variable explicative x_1, \dots, x_p ou variable à expliquer y) est entachée d'une erreur, ce qui revient à dire que chaque variable observée est la somme des deux termes : la variable que l'on veut effectivement observer plus une erreur.

On a donc :

$$(27) \quad \begin{cases} y = v_0 + r_0 \\ x_i = v_i + r_i \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, p)$$

où

v_0, v_1, \dots, v_p sont les variables vraies supposées centrées,

y, x_1, \dots, x_p sont les variables observées,

r_0, r_1, \dots, r_p sont les erreurs aléatoires centrées, de variances connues respectivement égales à $s_0^2, s_1^2, \dots, s_p^2$.

Nous supposerons ces distorsions indépendantes entre elles, et indépendantes des variables v_0, v_1, \dots, v_p , et nous désignerons par C la matrice de variance

de r_1, r_2, \dots, r_p :

$$(28) \quad C = \begin{pmatrix} s_1^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & s_p^2 \end{pmatrix}$$

Désirant expliquer v_0 par rapport aux v_i ($1 \leq i \leq p$), mais ne connaissant v_0, v_1, \dots, v_p que par les variables observées entachées l'erreur y, x_1, \dots, x_p , on cherche la combinaison linéaire $y - \sum b^i x_i$ la variance minimale; or ayant:

$$y - \sum b^i x_i = v_0 - \sum_{i=1}^p b^i v_i + r_0 - \sum_{i=1}^p b^i r_i$$

et du fait des hypothèses d'indépendance sur les erreurs, on a

$$(29) \quad \begin{cases} \text{Var}(y - \sum b^i x_i) = \text{Var}(v_0 - \sum b^i v_i) + \text{Var}(r_0 - \sum b^i r_i) \\ > \text{Var}(r_0 - \sum b^i r_i) = s_0^2 + \sum b_i^2 s_i^2 \\ = s_0^2 + \|\mathbf{b}\|_C^2 \end{cases}$$

la variance résiduelle est supérieure à la variance d'erreur.

Si l'on estime cette variance résiduelle à partir d'un n échantillon $(\mathbf{y}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p)$ de (y, x_1, \dots, x_p) et si l'on suppose que chaque observation j ($1 \leq j \leq n$) est affectée du poids p_j ($\sum_{j=1}^n p_j = 1$; en général $p_j = 1/n$), et que l'on a centré les variables observées,

$$\left(\sum_j p_j y^j = 0, \sum_j p_j x_i^j = 0 \quad (1 \leq i \leq p) \right),$$

cette variance résiduelle est estimée par la variance empirique égale à:

$$(30) \quad Q(\mathbf{b}) = \sum \{ p_j (y^j - \sum \{ b^i x_i^j / i = 1, p \})^2 \mid j = 1, n \} = \|\mathbf{y} - X' \mathbf{b}\|_{N=D_p}^2$$

en choisissant comme métrique N dans R^n .

$$(31) \quad N = D_p = \begin{pmatrix} p_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & p_n \end{pmatrix}$$

Pour qu'elle ait un sens, cette variance doit être supérieure à la variance d'erreur:

$$(32) \quad Q(\mathbf{b}) \geq s_0^2 + \|\mathbf{b}\|_C^2.$$

On sera donc ramené à minimiser $Q(\mathbf{b})$, sous la contrainte (32).

4.2.2. Recherche de la solution.

Si la solution $\hat{\mathbf{b}}$ des moindres carrés vérifie (32), alors elle convient; si par contre

$$Q(\hat{\mathbf{b}}) < s_0^2 + \|\hat{\mathbf{b}}\|_C^2.$$

Le minimum de $Q(\mathbf{b})$ sous la contrainte (32) sera réalisé pour \mathbf{b}^+ tel que :

$$(33) \quad Q(\mathbf{b}^+) = s_0^2 + \|\mathbf{b}^+\|_C^2.$$

On est donc ramené à minimiser $Q(\mathbf{b})$ sous la contrainte

$$Q(\mathbf{b}) = s_0^2 + \|\mathbf{b}\|_C^2.$$

Employant le multiplicateur de Lagrange λ , on doit donc minimiser

$$(34) \quad Q(\mathbf{b}) + \lambda(s_0^2 + \|\mathbf{b}\|_C^2 - Q(\mathbf{b})) \quad \text{ou encore} \quad (1 - \lambda)Q(\mathbf{b}) + \lambda(s_0^2 + \|\mathbf{b}\|_C^2)$$

d'où l'on déduit par dérivation matricielle, puisque $Q(\mathbf{b}) = \|\mathbf{y} - X'\mathbf{b}\|_N^2$:

$$- (1 - \lambda)XN(\mathbf{y} - X'\mathbf{b}) + \lambda C\mathbf{b} = 0 \quad \text{pour } \mathbf{b} = \mathbf{b}^+$$

d'où

$$(35) \quad \left(XNX' + \frac{\lambda}{1-\lambda} C \right) \mathbf{b}^+ = XN\mathbf{y}$$

λ étant déterminé de telle sorte que (33) soit vérifiée.

Posant $k = \lambda/(1 - \lambda)$, on retrouve l'expression trouvée dans le cas de la ridge régression, quand on munit E de la métrique $M_1 = C$, l'expression que l'on minimise s'écrivant en mettant $1 - \lambda$ en facteur, et du fait que $k + 1 = 1/(1 - \lambda)$:

$$(36) \quad (Q(\mathbf{b}) + k(\|\mathbf{b}\|_C^2 + s_0^2))/(k + 1).$$

De même que pour la ridge régression, on montre (cf. annexe 2) que la solution est fournie pour une valeur de k positive. On pourra donc, comme dans le cas de la ridge régression calculer \mathbf{b}^+ par une procédure itérative basée sur la formule (25), en comparant pour chaque valeur de k , $Q(\mathbf{b}_k)$ et $s_0^2 + \|\mathbf{b}_k\|_C^2$.

Signalons que le Professeur BENZECRI a suggéré une recherche directe de la solution, (qui a été programmée) basée sur les considérations géométriques exposées au 2.4.

5. EXEMPLES D'APPLICATION DE LA REGRESSION SOUS CONTRAINTE.

Estimation d'une courbe granulométrique.

Le problème est le suivant : on désire estimer à partir d'une méthode photo-électrique la courbe granulométrique d'un nuage de particules en suspension dans un gaz quelconque; cela revient, si l'on a divisé l'intervalle (d, d') des diamètres que peut avoir une particule du nuage en p classes $I_1 = ((d, d_1), I_2 = (d_1, d_2), \dots, I_p = (d_{p-1}, d')$, à rechercher les proportions $\{b^i | i = 1, p\}$, des particules du nuage contenues dans les intervalles. $\{I_i | i = 1, p\}$.

Pour faire cette estimation, on se sert des propriétés de diffusion du gaz considéré (dont les particules sont de diamètre compris entre 0 et $0,4 \mu$): toute particule de ce gaz placée dans un champ lumineux émet un rayonnement aléatoire; le nombre de photons émis par cette particule dans un intervalle de temps donné θ choisi comme unité ($\theta = 50 \mu s$), suit une loi de Poisson de paramètre α fonction du diamètre de cette particule.

Par étalonnage, on connaît la valeur α_i de α associée à chaque classe de diamètre I_i ($1 \leq i \leq p$).

La probabilité qu'une particule du nuage appartenant à I_i donne lieu à une émission de j photons est donc :

$$x_i^j = e^{-\alpha_i} (\alpha_i)^j / j!$$

et la probabilité qu'une particule du nuage émette j photons est donc :

$$p_j = \sum \{x_i^j b^i | i = 1, p\}.$$

Faisant passer une à une les particules du nuage dans un champ lumineux, pendant un intervalle de temps T grand par rapport à θ , et comptant à l'aide d'un appareillage physique approprié le nombre de particules N_j du nuage ayant émis j photons lors de leur traversée dans le champ lumineux, on obtient un histogramme expérimental associé à la loi des p_j ; si n désigne le nombre de classes de cet histogramme, et N le nombre total de particules qui sont passées dans le champ :

$$N = \sum \{N_j | j = 1, n\}$$

$y^j = N_j/N$ est une estimation de p_j (l'estimation donnée par la méthode du maximum de vraisemblance)

$$y^j \simeq p_j = \sum \{x_i^j b^i | i = 1, p\} \quad 1 \leq j \leq n$$

$$y^j = \sum \{x_i^j b^i | i = 1, p\} + e^j \quad 1 \leq j \leq n$$

avec

$$\begin{cases} b^i \geq 0 \\ \sum \{b^i | i = 1, p\} = 1 \end{cases}$$

pour que le modèle précédent ait un sens.

Nous donnons à la page suivante les résultats relatifs à deux histogrammes l'un à 16 classes, l'autre à 12 classes (n vaut soit 16, soit 12), les classes de diamètres étant au nombre de 8 ($p = 8$).

Dans chacun des deux cas, avec la métrique usuelle, nous avons fait :

- La régression classique.
- La régression classique en imposant à la somme des coefficients de régression de valoir 1.
- La ridge régression, en imposant aux coefficients de régression d'être de somme 1.
- La régression sous contraintes linéaires: coefficients de régression positifs et de somme 1.
- La régression sous contraintes linéaires: coefficients de régression positifs.

La somme des valeurs \hat{b}^i des b^i obtenue par la régression classique valant 1,0001 (histogramme à 16 classes) et 0,998 (histogrammes à 12 classes), les résultats de cette régression sont identiques à ceux de la régression où l'on impose à cette somme de valoir 1; nous ne donnerons donc que les résultats à cette dernière régression.

Les résultats sont résumés sur les tableaux 1 à 4; l'on a également fait figurer sur le tableau 2 les résultats fournis par la ridge régression classique (où l'on n'impose pas à la somme des $(b^i)^+$ de valoir 1) dans le cas de l'histogramme à 16 classes.

On voit que la régression classique donne des résultats aberrants, certains coefficients de régression étant négatifs, ou de module supérieur à 1 (cf. tableaux 3 et 4); ceci est essentiellement dû au fait que les variables explicatives sont très corrélées. C'est la raison pour laquelle outre la régression où l'on impose aux valeurs $(b^i)^+$ des b^i d'être positives, on a appliqué la ridge régression de façon à limiter la valeur de la norme de \mathbf{b} .

Pour la ridge régression, nous avons choisi comme métrique M_1 dans $(R^p)^*$ la métrique diagonale ayant mêmes éléments diagonaux que la matrice $XNX' = XX'$, et nous avons fait varier k (cf. 4.1) par pas de 0,05 de 0 à 0,95.

A partir d'une valeur k_0 de k (du moins quand on impose à la somme des coefficients de régression de valoir 1: $k_0 = 0,3$ pour la première régression, $k_0 = 0,35$ pour le seconde), toutes les estimations des coefficients de régression deviennent positives. Pour cette valeur k_0 de k , les résultats de la ridge régres-

sion ($\sum b^{i+} = 1$) sont voisins de ceux fournis par la régression sous contraintes linéaires (coefficients de régression positifs; coefficients de régression positifs et de somme 1) (cf. tableaux 1 et 3).

TABLEAU 1. - Comparaison des résultats obtenus entre la régression classique, la ridge régression, et la régression sous contraintes de positivité ($(b^i)^+ > 0$) dans le cas de l'histogramme à 16 classes.

i	\hat{b}^i	$\hat{\sigma}_i$	$(b^i)^+$	$(b^i)^+$	$(b^i)^+$
1	0.087	0.055	0.076	0.080	0.064
2	0.104	0.083	0.104	0.138	0.141
3	0.131	0.040	0.125	0.105	0.110
4	0.190	0.021	0.212	0.200	0.212
5	0.572	0.033	0.404	0.477	0.490
6	-0.201	0.088	0.058	0,483	0
7	0.161	0.128	0.001		0
8	-0.044	0.07	0.020		0
$\sum b^i$	1		1		1
S^2	0.0041		0.026	0.0098	0.0095
Modèle ou techniques	Moindres carrés classique ($\sum b^i = 1$)		ridge régression ($\sum (b^i)^+ = 1$) $\ b^+\ \leq 0.05$ ($k = 0,3$)	contraintes ($(b^i)^+ > 0$) $\sum (b^i)^+ = 1$	contraintes ($(b^i)^+ > 0$)

$$S^2 = \frac{\|y - y^+\|^2}{\|y^+\|^2} \text{ avec } y^+ \text{ approximation de } y \text{ pour le modèle considéré.}$$

$\hat{\sigma}_i$ estimation de l'écart type de \hat{b}^i .

Les tableaux 2 et 4 résument les résultats fournis par la ridge régression pour différentes valeurs de k ; on a également représenté sur le tableau 2, comme on l'a déjà signalé, les résultats de la ridge régression où l'on n'impose pas à la somme des coefficients de régression de valoir 1. On voit que dans ce cas, dès que $k \geq 0,05$, les valeurs négatives des $(b^i)^+$ deviennent faibles en module, et pour $k = 0,15$, où $\|b^+\|_{M_1}^2 = 0,5$; les résultats obtenus sont voisins de ceux fournis par la ridge régression $\sum (b^i)^+ = 1$, pour la même valeur 0,5 de $\|b^+\|_{M_1}^2$ (qui correspond à $k = k_0 = 0,30$).

En ce qui concerne la seconde régression (cf. tableau 4), dès que k est supérieur ou égal à 0,05, toutes les valeurs $(b^i)^+$ des b^i deviennent inférieures en module à 1, le carré de norme de b^+ passant de 58,95 ($k = 0$), à une valeur plus petite ou égale à 0,06 ($k \geq 0,05$).

TABLEAU 2. - *Etude en fonction de k des résultats donnés par la ridge régression dans le cas de l'histogramme à 16 classes.*

i	$(b^i)_0^+ = \hat{b}$	$(b^i)_{0,05}^+$	$(b^i)_{0,30}^+$	$(b^i)_{0,95}^+$	$(b^i)_{0,05}^+$	$(b^i)_{0,15}^+$	$(b^i)_{0,85}^+$
1	0.087	0.080	0.076	0.066	0.080	0.077	0.059
2	0.104	0.112	0.104	0.092	0.111	0.106	0.080
3	0.131	0.125	0.125	0.123	0.122	0.118	0.096
4	0.190	0.204	0.212	0.203	0.198	0.195	0.143
5	0.572	0.503	0.404	0.319	0.496	0.432	0.246
6	-0.201	-0.046	0.058	0.120	-0.049	0,004	0.059
7	0.161	-0.009	0.002	0.046	-0.012	-0.023	-0.002
8	-0.044	0.031	0.020	0.031	0.027	0.017	-0.004
$\sum (b^i)_k^+$	1	1	1	1	0.973	0.926	0.677
k	0	0.05	0.30	0.95	0.05	0.15	0.95
$\ b_k^+\ ^2$	0.08	0.06	0.05	0.04	0.06	0.05	0.03
S^2	0.0041	0.0062	0.026	0.082	0.0067	0.016	0.136
	Ridge régression avec $\sum (b^i)_k^+ = 1$				Ridge régression classique		

TABLEAU 3. - *Comparaison des résultats obtenus entre la régression classique, la ridge régression, et la régression sous contraintes linéaires ($(b^i)^+ > 0$) (histogramme à 12 classes).*

i	\hat{b}^i	$\hat{\sigma}_i$	$(b^i)^+$	$(b^i)^+$	$(b^i)^+$
1	5.095	5.28	0.052	0.012	0.077
2	-6.041	6.38	0.059	0.079	0.0003
3	1.246	1.18	0.102	0.129	0.161
4	0.050	0.10	0.141	0.110	0.106
5	0.240	0.036	0.280	0.291	0.288
6	0.671	0.084	0.308	0.379	0.374
7	-0.560	0.178	0.056	0	0
8	0.299	0.130	0.002	0	0
$\sum b^i$	1		1	1	1.0063
S^2	0.0034		0.032	0.0194	0.0191
Modèle ou technique	Moindres carrés classiques ($\sum b^i = 1$)		ridge régression ($\sum (b^i)^+ = 1$) $\ b^+\ ^2 < 0.046$ ($k = 0.35$)	contraintes $(b^i)^+ > 0$ $\sum (b^i)^+ = 1$	contraintes $(b^i)^+ > 0$

$$S^2 = \frac{\|y - y^+\|^2}{\|y^+\|^2} \text{ où } y^+ \text{ est l'approximation de } y \text{ pour le modèle considéré.}$$

$\hat{\sigma}_i$ estimation de l'écart type de \hat{b}^i .

TABLEAU 4. - *Etude en fonction de k des résultats donnés par la ridge régression dans le cas de l'histogramme à 12 classes.*

	$(b^i)_0^+ = \hat{b}^i$	$(b^i)_{0,05}^+$	$(b^i)_{0,35}^+$	$(b^i)_{0,95}^+$
1	5.095	0.048	0.052	0.051
2	-6.041	0.056	0.059	0.057
3	1.246	0.119	0.102	0.095
4	0.050	0.132	0.141	0.144
5	0.240	0.271	0.280	0.267
6	0.671	0.427	0.308	0.256
7	-0.560	-0.033	0.056	0.088
8	0.299	-0.02	0.002	0.042
			0,366	0,386
$\sum (b^i)_k^+$	1	1	1	1
k	0	0.05	0.35	0.95
$\ b_k^+\ ^2$	58.95	0.066	0.046	0.041
S^2	0.0034	0.013	0.032	0.061

Quand k augmente dans les deux cas étudiés ($n = 16$ et $n = 12$), les valeurs $(b^i)^+$ peu stables dans la ridge régression correspondent aux $(b^i)^+$ annulés par les contraintes de positivité.

En fait, la somme pour $i > i_0$ des $(b^i)^+$, ($\sum \{(b^i)^+ | i = i_0, p\}$) ($i_0 = 5$ dans la première régression, $i_0 = 6$ dans la seconde) obtenus par la ridge régression varie peu quand k varie, cette somme étant voisine de la même somme calculée sur les $(b^i)^+$ fournis par la régression sous contrainte de positivité ($(b^i)^+ > 0$, et $(b^i)^+ > 0$ et de somme 1); dans le dernier cas les $(b^i)^+$ étant nuls pour $i > i_0$, cette somme se réduit à $(b^{i_0})^+$.

D'un point de vue physique, cela revient à dire que ce que l'on estime avec précision, c'est le pourcentage de particules de diamètre supérieur ou égal à d_{i_0-1} .

L'approximation réalisée par ces différents types de régression est excellente, puisque le résidu S^2 (égal à $\|\mathbf{y} - \mathbf{y}^+\|^2 / \|\mathbf{y}\|^2$, si \mathbf{y}^+ désigne l'approximation de \mathbf{y}) est toujours inférieur à 0,1 sauf dans le cas de la ridge régression, où l'on n'impose pas $\sum (b^i)^+ = 1$ (cas de la première régression, où $n = 16$), S^2 devenant supérieur à 0,1 pour $k = 0,75$, et atteignant la valeur 0,136 pour $k = 0,95$.

En conclusion, on voit que sur les deux cas étudiés (et en particulier dans le second) la ridge régression, et la régression sous contraintes de positivité des coefficients protègent bien la régression, et donnent des résultats équivalents, la régression sous contraintes de positivité semblant s'imposer dans ces deux exemples, du fait de la nature du modèle.

ANNEXE 1.

Etude en fonction de k de $f(k) = \|\mathbf{b}_k\|_{M_1}^2$, et calcul de $g(k) = \mathcal{Q}_1(\mathbf{b}_k) = \|\mathbf{b}_k - \hat{\mathbf{b}}\|_{M - XNX'}^2$, sachant que $\mathbf{b}_k = (XNX' + kM_1)^{-1} XN\mathbf{y}$ ($\mathbf{b}_0 = \hat{\mathbf{b}}$).

M_1 étant une forme quadratique définie positive peut se décomposer sous la forme :

$$(1) \quad M_1 = TT'.$$

On a alors :

$$(2) \quad \begin{aligned} XNX' + kM_1 &= XNX' + kTT' \\ &= T(T^{-1}XNX'(T')^{-1} + kI)T' \\ &= T(M_2 + kI)T' \end{aligned}$$

en posant

$$(3) \quad M_2 = T^{-1}XNX'(T')^{-1}$$

qui est une forme quadratique définie positive (si XNX' est régulière, ce que nous supposons).

On a donc d'après les relations (1) à (3), et du fait que $XNX'\hat{\mathbf{b}} = XN\mathbf{y}$:

$$(4) \quad \begin{aligned} \mathbf{b}_k &= T'^{-1}(M_2 + kI)^{-1}T^{-1}XNX'\hat{\mathbf{b}} \\ &= T'^{-1}(M_2 + kI)^{-1}M_2T'\hat{\mathbf{b}} \\ &= \underline{\underline{T'^{-1}(I + kM_2^{-1})^{-1}T'\hat{\mathbf{b}}}}. \end{aligned}$$

Expression de $f(k)$.

De (4) l'on déduit

$$(5) \quad f(k) = \|\mathbf{b}_k\|_{M_1=TT'}^2 = \|(I + kM_2^{-1})^{-1}T'\hat{\mathbf{b}}\|_I^2.$$

Si $\{\mathbf{W}_i | i = 1, p\}$ désigne un système de vecteurs propres orthonormés (au sens usuel, i.e. pour la métrique unité) de M_2 , \mathbf{W}_i étant relatif à la valeur propre λ_i (*):

$$\begin{aligned} M_2\mathbf{W}_i &= \lambda_i\mathbf{W}_i \\ \langle \mathbf{W}_i, \mathbf{W}_j \rangle &= \delta_i^j = 1 \quad \text{si } i = j, \\ &= 0 \quad \text{si non,} \end{aligned}$$

(*) Nous supposons les valeurs propres rangées par ordre décroissant, i.e. : $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p > 0$.

si l'on pose :

$$(5 \text{ bis}) (*) \quad \alpha_i = \langle T' \hat{\mathbf{b}}, \mathbf{W}_i \rangle_I = \langle \hat{\mathbf{b}}, T \mathbf{W}_i \rangle_I$$

on a

$$(6) \quad h(k) = \sum \left\{ \frac{\alpha_i^2}{(1 + k/\lambda_i)^2} \mid i = 1, p \right\} = \sum \left\{ \frac{\lambda_i^2}{(\lambda_i + k)^2} \alpha_i^2 \mid i = 1, p \right\}$$

Expression de $g(k) = Q_1(\mathbf{b}_k) = \|\mathbf{b}_k - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}$

D'après (4), l'on a :

$$(7) \quad \mathbf{b}_k - \hat{\mathbf{b}} = T'^{-1}[(I + kM_2^{-1})^{-1} - I] T' \hat{\mathbf{b}}.$$

On en déduit, puisque, d'après (3)

$$(8) \quad M = XNX' = TM_2 T'$$

que

$$(9) \quad \begin{aligned} g(k) &= \|\mathbf{b}_k - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2 \\ &= T'^{-1}[(I + kM_2^{-1})^{-1} - I] T' \hat{\mathbf{b}} \|_{TM_2 T'}^2 \\ &= \|[I + kM_2^{-1})^{-1} - I] T' \hat{\mathbf{b}}\|_{M_2}^2 \\ &= \|T' \hat{\mathbf{b}}\|_A^2 \end{aligned}$$

avec

$$(10) \quad A = ((I + kM_2^{-1})^{-1} - I) M_2 ((I + kM_2^{-1})^{-1} - I)$$

A a même vecteurs propres que M_2 , la valeur propre $\lambda_i(A)$ associée à \mathbf{W}_i s'écrivant :

$$(11) \quad \lambda_i(A) = \left(\frac{1}{1 + k/\lambda_i} - 1 \right)^2 \lambda_i = k^2 \frac{\lambda_i}{(\lambda_i + k)^2}$$

on a donc d'après (5 bis), (9) et (11) :

$$(12) \quad \underline{g(k) = k^2 \sum \left\{ \frac{\lambda_i \alpha_i^2}{(\lambda_i + k)^2} \mid i = 1, p \right\}}$$

Etude de $f(k)$.

Dès que k est plus grand que $-\lambda_p$, λ_p étant, rappelons le, la plus petite valeur propre de M_2 , $f(k)$ est d'après (6) une fonction décroissante de k .

(*) \mathbf{W}_i étant vecteur propre de $M_2 = T^{-1}XNX'(T')^{-1}$, $T\mathbf{W}_i$ est vecteur propre (relatif à la même valeur propre) de $XNX'(T')^{-1}T^{-1} = XNX'M_1^{-1}$.

Si donc $f(0) = \|\hat{\mathbf{b}}\|_{M_1}^2 > a^2$, il existe une seule valeur positive k_0 de k telle que $f(k_0) = a^2$.

Par contre il peut exister une ou plusieurs valeurs négatives k'_0 de k telles que $f(k'_0) = a^2$ (k'_0 étant bien sur plus petit que $-\lambda_p$).

Nous allons voir que le minimum de $\|\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}$ sous la contrainte $\|\mathbf{b}\|_{M_1}^2 = a^2$ (on suppose bien sûr que $\|\hat{\mathbf{b}}\|_{M_1}^2 > a^2$), i.e. le minimum de

$$R = \|\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}\|_{M_1=XX'}^2 + k(\|\mathbf{b}^+\|_{M_1}^2 - a^2)$$

sous la contrainte précédente est réalisé pour $\mathbf{b}^+ = \mathbf{b}_{k_0}$.

En effet, on a

$$(13) \quad \begin{cases} \partial R / \partial \mathbf{b}^+ = 2(XX' + kM_1)\mathbf{b}^+ - 2XX'\hat{\mathbf{b}} \\ \partial^2 R / (\partial \mathbf{b}^+)^2 = 2(XX' + kM_1) = 2T(M_2 + kI)T' \end{cases}$$

avec

$$\|\mathbf{b}^+\|_{M_1}^2 = a^2$$

d'où l'on déduit les résultats déjà vus :

$$\mathbf{b}^+ = \mathbf{b}_k \quad \text{avec} \quad f(k) = a^2$$

Comme $\partial^2 R / (\partial \mathbf{b}^+)^2$ n'est défini positive que pour $k > -\lambda_p$, la seule valeur de k qui convient est k_0 C.Q.F.D..

ANNEXE 2.

Etude en fonction de k de

$$l(k) = s_0^2 + \|\mathbf{b}_k\|_C^2 - \|\mathbf{y} - X'\hat{\mathbf{b}}\|_N^2 - \|\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{b}_k\|_{M=XX'}^2$$

avec $\mathbf{b}_k = (XX' + kC)^{-1}XN\mathbf{y}$, et sachant que $\varrho(0) > 0$.

Nous poserons :

$$(1) \quad \begin{cases} \gamma = s_0^2 - \|\mathbf{y} - X'\hat{\mathbf{b}}\|_N^2 \\ M_1 = C = TT' \\ M_2 = T^{-1}XX'(T')^{-1} \\ f(k) = \|\mathbf{b}_k\|_{TT'}^2 \\ g(k) = \|\mathbf{b}_k - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2 \end{cases}$$

de façon à conserver les mêmes notations que dans l'annexe 1.

Dans ces conditions, on a :

$$l(k) = \gamma + f(k) - g(k)$$

soit d'après l'annexe 1 (formules (6) et (12)) :

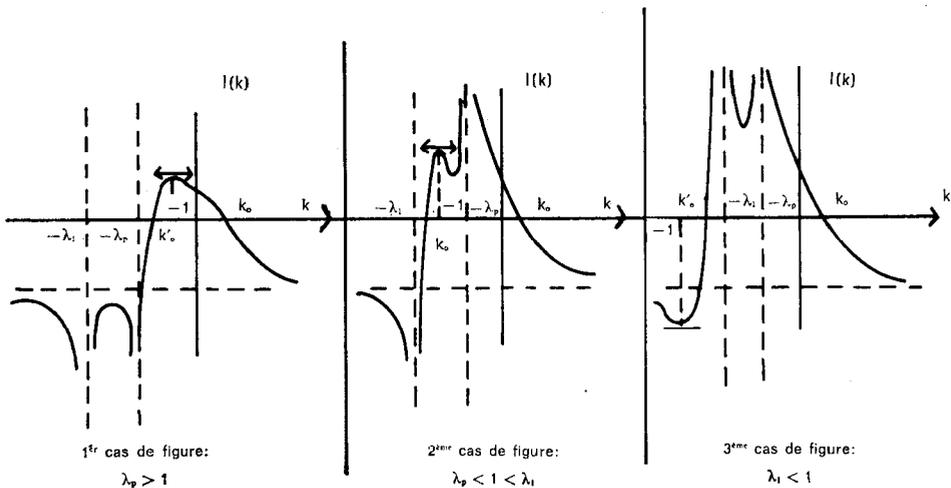
$$(2) \quad \left\{ \begin{aligned} l(k) &= \gamma + \sum \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_i + k} \right)^2 \alpha_i^2 - k^2 \sum \frac{\lambda_i \alpha_i^2}{(\lambda_i + k)^2} \\ &= \gamma + \sum \left\{ \frac{\lambda_i \alpha_i^2 (\lambda_i - k^2)}{(\lambda_i + k)^2} \mid i = 1, p \right\} \end{aligned} \right.$$

$\{\lambda_i \mid i = 1, p\}$ désignant toujours les valeurs propres de M_2 rangées par valeurs décroissantes, et α_i étant le produit scalaire (pour la métrique usuelle) de \hat{b} avec TW_i , W_i étant le vecteur propre normé (pour la métrique usuelle) de M_2 relatif à la valeur propre λ_i .

Etude de $l(k)$ en fonction de k (cf. figure 1).

De (2) l'on déduit :

$$\frac{dl}{dk} = -2(k+1) \sum \left\{ \frac{\lambda_i \alpha_i^2}{(\lambda_i + k)^3} \mid i = 1, p \right\}$$



$$\text{Etude de } l(k) = \gamma + \sum_{i=1}^p \frac{\lambda_i \alpha_i^2 (\lambda_i - k^2)}{(\lambda_i + k)^2}$$

(avec $l(0) > 0$)

Figure 1.

Dès que k est supérieur à $\sup(-1, -\lambda_p)$, dl/dk est négatif, donc l est une fonction décroissante de k ; comme $l(O) > 0$, il existe donc une valeur positive unique k_0 de k telle que $l(k_0) = 0$.

Il existe au moins une autre valeur k'_0 de k négative telle que $l(k'_0) = 0$ ($k'_0 < \sup(-1, -\lambda_p)$).

Nous allons montrer que seul $\mathbf{b}^+ = \mathbf{b}_{k_0}$ assure le minimum de $\|\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2$ sous la contrainte

$$(3) \quad \gamma_0^2 + \|\mathbf{b}^+\|_{M_1}^2 - \|\mathbf{y} - X'\hat{\mathbf{b}}\|_N^2 - \|\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{b}^+\|_{M=XX'}^2 = 0.$$

En effet minimiser $\|\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2$ sous la contrainte (3) revient à minimiser :

$$U = \|\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2 + \lambda(\gamma + \|\mathbf{b}^+\|_{M_1}^2 - \|\hat{\mathbf{b}} - \mathbf{b}^+\|_{M=XX'}^2)$$

sous la contrainte (3).

U s'écrit encore :

$$U = (1 - \lambda)\|\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}\|_{M=XX'}^2 + \lambda(\gamma + \|\mathbf{b}^+\|_{M_1}^2)$$

d'où l'on déduit :

$$\partial U / \partial \mathbf{b}^+ = 2[(1 - \lambda)XNX'(\mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}}) + \lambda M_1 \mathbf{b}^+] = 0$$

$$\partial^2 U / (\partial \mathbf{b}^+)^2 = 2[(1 - \lambda)XNX' + \lambda M_1].$$

Posant $k = \lambda/(1 - \lambda')$ on retrouve les résultats déjà vus :

$$\mathbf{b}^+ = \mathbf{b}_k \quad \text{avec } l(k) = 0.$$

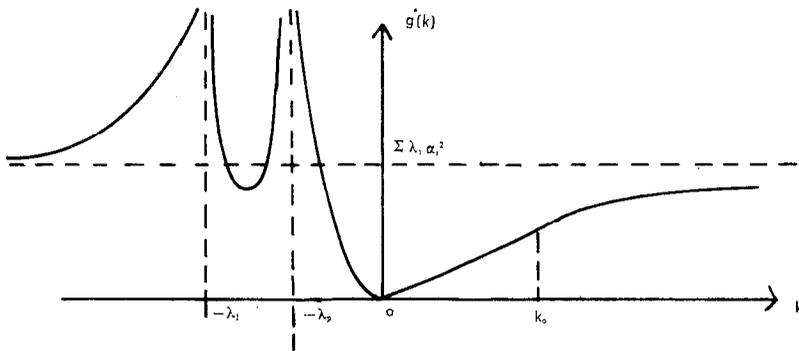
De plus, on a

$$\partial^2 U / (\partial \mathbf{b}^+)^2 = \frac{2T(M_2 + kI)T'}{(k + 1)}$$

qui n'est définie positive que si k est plus grand que $\sup(-1, -\lambda_p)$ (ce qui est le cas pour k_0 , mais pas pour k'_0), ou si k est plus petit que $\inf(-1, -\lambda_1)$.

Comme $\forall k < -\lambda_1$, on a (cf. figure 2) :

$$g(k) = \|\mathbf{b}^k - \hat{\mathbf{b}}\|_M^2 = k^2 \sum \frac{\lambda_i \alpha_i^2}{(\lambda_i + k)^2} > \sum \lambda_i \alpha_i^2 > g(k_0) = \|\mathbf{b}_{k_0} - \hat{\mathbf{b}}\|_M^2$$



$$\begin{aligned} \text{Etude de } g(k) &= \| \mathbf{b}_k - \hat{\mathbf{b}} \|^2_{N \times p, k} \\ &= k^2 \sum_{i=1}^p \frac{\lambda_i \alpha_i^2}{(\lambda_i + k)^2} \end{aligned}$$

Figure 2.

(puisque $k_0 > 0$), on en déduit que le minimum de $\| \mathbf{b}^+ - \hat{\mathbf{b}} \|^2_M$ sous la contrainte (3) est obtenu pour $\mathbf{b}^+ = \mathbf{b}_{k_0}$. C.Q.F.D..

BIBLIOGRAPHIE

- [1] BENZECRI, *La régression* (publication du laboratoire de statistiques mathématiques), (1970).
- [2] CAZES - TURPIN, *Régression sous contraintes. Application à l'estimation de la courbe granulométrique d'un aérosol*, Revue de Statistique appliquée, **19**, 4 (1971).
- [3] HOERL - KENNARD, *Ridge régression: Biased estimation for non orthogonal problems*, Technometrics, **12**, 1 (1970).
- [4] HOERL - KENNARD, *Ridge regression: Applications to non orthogonal problems*, Technometrics, **12**, 1 (1970).
- [5] MARQUARDT, *Generalized inverses, Ridge regression, biased linear estimation and non linear estimator*, Technometrics, **12**, 3 (1970).
- [6] ROSENBERG, *Problèmes de corrélations multiples avec contraintes en hydrologie*, Bull. of the Intern. Association of Scientific hydrologists, **15**, 3 (sept. 1970).