

3. MOINDRES CARRÉS

3.1. Notations et hypothèses. On rappelle que la dimension de l'espace des états (ou espace modèle) est n , et celle de l'espace des observations est p . Dans un contexte géophysique, on a généralement $p \ll n$.

On note :

- x_t l'état *vrai* (ou réel) du système (dimension n);
- x_b une ébauche de l'état du modèle (dimension n);
- x_a l'état analysé du modèle (dimension n);
- y le vecteur d'observations (dimension p);
- H l'opérateur d'observation (défini d'un espace de dimension n dans un espace de dimension p);
- B la matrice de covariance des erreurs d'ébauche ($x_b - x_t$) (dimension $n \times n$);
- R la matrice de covariance des erreurs d'observation ($y - H(x_t)$) (dimension $p \times p$);
- A la matrice de covariance des erreurs d'analyse ($x_a - x_t$) (dimension $n \times n$).

Les hypothèses suivantes sont couramment faites :

- l'opérateur d'observation est linéaire, ou linéarisé : on suppose que $H(x) - H(x_b) = H(x - x_b)$;
- B et R sont des matrices définies positives (les erreurs ne sont pas nulles);
- il n'y a pas de biais dans les erreurs : les espérances des erreurs d'ébauche et d'observations sont nulles, $E(x_b - x_t) = 0 = E(y - H(x_t))$;
- les erreurs d'ébauche et d'observations sont décorréliées : $E((x_b - x_t)(y - H(x_t))^T) = 0$;
- l'analyse est linéaire : on cherche une correction qui dépend linéairement des observations et de l'ébauche. On cherche généralement à faire apparaître le vecteur d'innovation, $y - H(x_b)$;
- l'analyse est optimale : on cherche un état analysé qui est aussi près que possible de l'état réel du système, au sens des moindres carrés, ou du minimum de variance.

3.2. Moindres carrés.

Théorème 3.1. *L'estimateur moindres carrés optimal, ou BLUE (Best Linear Unbiased Estimator), est défini par l'interpolation suivante :*

$$(5) \quad x_a = x_b + K(y - H(x_b)), \quad K = BH^T(HBH^T + R)^{-1},$$

où l'opérateur linéaire K est appelé *gain*, ou *matrice de gain de l'analyse*. L'état analysé x_a est *optimal* : il est le plus près de l'état réel du système x_t au sens des moindres carrés.

Démonstration. La preuve s'appuie fortement sur le théorème suivant, donc nous démontrons les deux théorèmes en même temps. \square

Théorème 3.2. *La matrice de covariance d'erreur d'analyse est, pour n'importe quel gain K ,*

$$(6) \quad A = (I - KH)B(I - KH)^T + KRK^T.$$

Si K est le gain optimal (au sens des moindres carrés), l'expression devient :

$$(7) \quad A = (I - KH)B.$$

Démonstration. L'erreur d'analyse est

$$\begin{aligned}\varepsilon_a &= x_a - x_t = x_a - x_b + x_b - x_t = K(y - H(x_b)) + \varepsilon_b \\ &= K(y - H(x_t) + H(x_t) - H(x_b)) + \varepsilon_b = K(\varepsilon_o - H\varepsilon_b) + \varepsilon_b,\end{aligned}$$

donc $\varepsilon_a = (I - KH)\varepsilon_b + K\varepsilon_o$. La matrice de covariance d'erreur d'analyse est donc :

$$\begin{aligned}A &= E(\varepsilon_a \varepsilon_a^T) = E([(I - KH)\varepsilon_b + K\varepsilon_o][(I - KH)\varepsilon_b + K\varepsilon_o]^T) \\ &= (I - KH)E(\varepsilon_b \varepsilon_b^T)(I - KH)^T + KE(\varepsilon_o \varepsilon_o^T)K^T\end{aligned}$$

par décorrélation des erreurs d'observations et d'ébauche.

Afin d'obtenir la matrice *optimale*, il faut minimiser la variance de l'erreur d'analyse. On peut voir l'expression de A comme une fonction $A(K)$. Calculons la dérivée de $A(K)$:

$$A(K + \varepsilon L) - A(K) = -\varepsilon LHB(I - KH)^T - \varepsilon(I - KH)B(LH)^T + \varepsilon^2(LH)B(LH)^T + \varepsilon LRK^T + \varepsilon KRL^T + \varepsilon^2 LRL^T$$

donc en divisant par ε et en faisant tendre ε vers 0, on obtient :

$$\frac{1}{\varepsilon}[A(K + \varepsilon L) - A(K)] \rightarrow -LHB(I - KH)^T - (I - KH)B(LH)^T + LRK^T + KRL^T.$$

On peut factoriser le résultat :

$$\frac{dA}{dK} \cdot L = L[(HBH^T + R)K^T - HB] + [K(HBH^T + R) - BH^T]L^T$$

et on voit que la dérivée est nulle, quelle que soit la matrice test L si et seulement si

$$K(HBH^T + R) - BH^T = 0 \Leftrightarrow K = BH^T(HBH^T + R)^{-1},$$

les matrices B et R étant symétriques définies positives. En choisissant cette matrice de gain, la variance de l'erreur est alors minimale, donc l'estimateur est le meilleur possible.

Il nous reste à substituer l'expression de K dans la matrice A :

$$A = (I - KH)B - BH^T K^T + KHBH^T K^T + KRK^T = (I - KH)B + [K(HBH^T + R) - BH^T]K^T,$$

ce qui se simplifie en $A = (I - KH)B$ pour la matrice K optimale. \square

Théorème 3.3. *L'analyse BLUE est obtenue de façon équivalente comme le minimum du problème d'optimisation suivant : $x_a = \arg \min J$, avec*

$$(8) \quad J(x) = (x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + (y - H(x))^T R^{-1}(y - H(x)) = J_b(x) + J_o(x),$$

où J est la fonction coût de l'analyse, J_b est la partie du coût correspondant à l'ébauche, et J_o aux observations.

Démonstration. La minimisation a un sens, car J_o est une fonctionnelle convexe, et J_b est strictement convexe, donc J est strictement convexe (c'est une forme quadratique). Elle admet alors un unique minimum, qui est caractérisé par l'équation d'Euler : le gradient de J est nul à l'optimum.

$$\begin{aligned}\nabla J(x) &= 2B^{-1}(x - x_b) - 2H^T R^{-1}(y - Hx) = 0 \\ \Leftrightarrow B^{-1}(x - x_b) - H^T R^{-1}(y - Hx_b) - H^T R^{-1}H(x - x_b) &= 0 \\ \Leftrightarrow x - x_b &= (B^{-1} + H^T R^{-1}H)^{-1}H^T R^{-1}(y - Hx_b)\end{aligned}$$

et donc le minimum est donné par

$$x = x_b + (B^{-1} + H^T R^{-1}H)^{-1}H^T R^{-1}(y - Hx_b).$$

L'équivalence avec l'analyse du BLUE se fait en utilisant le résultat d'algèbre linéaire suivant :

$$(B^{-1} + H^T R^{-1} H)^{-1} H^T R^{-1} = B H^T (H B H^T + R)^{-1}.$$

Il suffit de multiplier les deux côtés de l'égalité par $(B^{-1} + H^T R^{-1} H)$ à gauche et par $(H B H^T + R)$ à droite, et on obtient :

$$\begin{aligned} H^T R^{-1} (H B H^T + R) &= (B^{-1} + H^T R^{-1} H) (B H^T) \\ \implies H^T R^{-1} H B H^T + H^T &= H^T + H^T R^{-1} H B H^T, \end{aligned}$$

ce qui est évidemment vrai. Donc le minimum de la fonction coût J est bien l'état analysé par le BLUE. \square

3.3. Remarques. Les hypothèses nécessaires pour obtenir les résultats énoncés dans les théorèmes peuvent être contournées.

En ce qui concerne les matrices de covariance, si celle concernant l'ébauche n'est pas définie positive, on peut toujours restreindre l'espace de contrôle à l'orthogonal du noyau de B , ce qui, d'après l'expression de l'analyse, reviendra à ne pas corriger dans l'analyse les directions où l'ébauche est bonne (erreur nulle). De même, la matrice R^{-1} pourrait avoir des valeurs propres nulles, il suffit alors d'éliminer les observations correspondantes, puisque l'erreur correspondante est infinie. Si la matrice H n'est pas une surjection, on peut également éliminer des observations, certaines étant redondantes.

L'hypothèse de biais nul est plus vraisemblable, car les appareils de mesure par exemple en sont souvent pourvus. Si les biais sont connus, on peut les soustraire des valeurs des observations ou de l'ébauche pour se ramener à une situation non biaisée. S'ils ne sont pas connus, il est possible d'en obtenir une bonne approximation en étudiant les statistiques (notamment la moyenne) des écarts entre observations, ébauche, et état du système.

L'hypothèse de décorrélation entre les erreurs est plus crédible, car l'erreur sur l'ébauche semble naturellement décorrélée des erreurs de mesures (même si parfois l'ébauche utilisée s'appuie sur les observations).

L'hypothèse linéaire tangente (qui concerne l'opérateur d'observation ici, mais qui peut également concerner le modèle) est justifiée au moins lorsque les états sont relativement proches. En effet, la variation d'une fonction peut s'approcher par sa dérivée lorsque l'écart n'est pas trop grand : en première approximation, $H(x + \delta x) - H(x) \simeq H'(x)\delta x$. En supposant que les états considérés ne s'éloignent pas trop de l'ébauche (ce qui est généralement le cas, puisqu'il y a notamment un terme de rappel dans la fonction coût), alors on peut linéariser (ou dériver) l'opérateur d'observation autour de la solution x_b .

3.4. Un exemple simple. Supposons que l'on souhaite estimer la température T_t de la pièce. Pour cela, on utilise un thermomètre de précision connue (σ_o sera l'écart-type de l'erreur de mesure), et on observe la température T_o . On suppose que la moyenne de T_o est T_t , avec une variance σ_o^2 . En absence d'autre information, la meilleure estimation de la température sera donc T_o , avec une précision de σ_o .

On suppose maintenant qu'on a une autre information sur la température de la pièce. Il peut s'agir d'une autre mesure avec un autre thermomètre (indépendant), mais il peut s'agir de constatations simples, comme par exemple le ressenti, la façon dont les gens sont habillés dans la pièce, la température dans la pièce la veille, ... On suppose que cette information a priori permet de définir une ébauche

de la température T_b , indépendamment de la mesure que l'on peut faire avec le thermomètre (observation). On suppose que l'espérance de T_b est T_t (pas de biais), et que son écart-type est σ_b . C'est la meilleure estimation en absence d'autre information.

Maintenant, si l'on combine la mesure T_o avec l'ébauche T_b , on peut chercher un compromis entre les deux, avec l'analyse suivante :

$$T_a = kT_o + (1 - k)T_b$$

ou encore $T_a = T_b + k(T_o - T_b)$.

La variance de l'erreur de cette estimation est

$$\sigma_a^2 = (1 - k)^2\sigma_b^2 + k^2\sigma_o^2$$

si on suppose les erreurs décorréelées. La valeur de k qui minimise la variance de l'erreur d'analyse est

$$k = \frac{\sigma_b^2}{\sigma_b^2 + \sigma_o^2}.$$

Une façon équivalente d'obtenir l'analyse T_a est de minimiser la fonction coût

$$J(T) = J_b(T) + J_o(T) = \frac{(T - T_b)^2}{\sigma_b^2} + \frac{(T - T_o)^2}{\sigma_o^2}.$$

Chacun des deux termes est une fonction quadratique dont la minimisation tend vers l'ébauche et l'observation respectivement, alors que la minimisation de J va chercher à faire un compromis entre les deux.

Si l'observation mesurée par le thermomètre est très mauvaise ($\sigma_o \gg \sigma_b$), alors k sera proche de 0, ce qui revient à prendre $T_a \simeq T_b$. L'analyse ne tiendra donc pas compte de la mesure (très mauvaise).

À l'inverse, si l'observation est très précise ($\sigma_o \ll \sigma_b$), alors k sera proche de 1, ce qui revient à prendre $T_a \simeq T_o$: on utilise directement la mesure, comme elle est très fiable.

Si les deux estimations T_o et T_b ont la même précision ($\sigma_o = \sigma_b$), alors k sera égal à $\frac{1}{2}$, et T_a sera simplement la moyenne de T_o et T_b .

Enfin, si on regarde la variance de l'erreur d'analyse, on trouve

$$\frac{1}{\sigma_a^2} = \frac{1}{\sigma_o^2} + \frac{1}{\sigma_b^2},$$

ou encore $\sigma_a^2 = k\sigma_o^2 = (1 - k)\sigma_b^2$. Cela montre que dans tous les cas, l'erreur d'analyse est inférieure à la fois à l'erreur d'observation et à celle d'ébauche. Et elle est la plus petite quand les erreurs d'observation et d'ébauche sont égales, et alors la variance de l'erreur d'analyse est deux fois plus petite.