Formalisation d'un fit de modèle

Pierre Aubert

7 juin 2015

Avant propos

Dans ce papier, je vais formuler la marche a suivre pour faire un fit de modèle sur des données.

Table des matières

1 Introduction

Le fit de modèle sur des données est quelque chose de très courant en physique, mais je vais formuler les choses histoire d'avoir les idées claires.

2 Fomulation mathématique, à une dimension

Soit un ensemble de données (mesurées) à une dimension $\mathbf{x} = [(x_1, y_1, \sigma_1), \cdots, (x_n, y_n, \sigma_n)]$ et un modèle $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}$ que l'on doit ajuster aux données $\mathbf{x}$ et jouant sur ses m paramètres, $\mathbf{p} = (p_1, \cdots, p_m)$.

$$\begin{array}{rcl} f \quad : \quad \mathbb{R} \times \mathbb{R}^m & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (x, \mathbf{p}) & \longmapsto & y \end{array} \tag{1}$$

On définit la fonction d'erreur χ^2 (que l'on appelle χ^2 réduit) comme étant :

$$\begin{array}{rcl} \chi^2 \quad : \quad \mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^m & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (\mathbf{x}, \mathbf{p}) & \longmapsto & r = \dfrac{1}{n-m} \sum_{i=1}^{n} \dfrac{(y_i - f(x_i, \mathbf{p}))^2}{\sigma_i^2} \end{array} \tag{2}$$

Le but du fit est de minimiser la fonction χ^2. On peut donc utiliser un algorithme de minimisation comme celui de Levenberg-Marquart (dont je parlerai dans un autre pdf).

$$\beta^{\mathbf{s+1}} = \beta^{\mathbf{s}} - \left(J_f^T J_f + \lambda D\right)^{-1} J_f^T f \tag{3}$$

Où la matrice jacobienne de χ^2 s'écrit :

$$J_f(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(\mathbf{p}) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \tag{4}$$

Par exemple, si f est un modèle qui décrit une gaussiènne, on pourait la définir comme ceci :

$$\begin{aligned} f \quad : \quad \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (x, \sigma, \mu, \alpha) &\longmapsto y = \alpha \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \end{aligned} \tag{5}$$

En toute rigueure, la matrice jacobiene de f est données par :

$$J_f(x, \sigma, \mu, \alpha) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial \sigma} \\ \frac{\partial f}{\partial \mu} \\ \frac{\partial f}{\partial \alpha} \end{pmatrix} \tag{6}$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha \frac{-2x - \mu^2 + 2\mu}{2\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \frac{\alpha}{\sigma^3}\left(x^2 + \mu^2 - 2x\mu\right) \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \alpha \frac{-x^2 - 2\mu + 2x}{2\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \end{pmatrix} \tag{7}$$

Et $J_f^T J_f$ à la forme :

$$J_f^T J_f = \exp^2\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\left[\frac{\alpha^2}{4\sigma^4}\left(-2x-\mu^2+2\mu\right)^2 + \frac{\alpha^2}{\sigma^6}\left(x^2+\mu^2-2x\mu\right)^2 + \frac{\alpha^2}{4\sigma^4}\left(-x^2-2\mu+2x\right)^2 + 1\right] \tag{8}$$

$$= \exp^2\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\left[\frac{\alpha^2}{4\sigma^4}\left(x^4 - 4x^3 + 8x^2 + \mu^4 - 4\mu^3 + 8\mu^2 + 4\mu x^2 + 4x\mu^2 - 16x\mu\right)\right] \tag{9}$$

$$+ \exp^2\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\left[\frac{\alpha^2}{\sigma^6}\left(x^2+\mu^2-2x\mu\right)^2 + 1\right] \tag{10}$$

$$\Omega = \left(-2x-\mu^2+2\mu\right)^2 + \left(-x^2-2\mu+2x\right)^2 \tag{11}$$

$$= \left(-2x-\mu^2+2\mu\right)\left(-2x-\mu^2+2\mu\right) + \left(-x^2-2\mu+2x\right)\left(-x^2-2\mu+2x\right) \tag{12}$$

$$= 4x^2 + 2x\mu^2 - 4x\mu + 2x\mu^2 + \mu^4 - 2\mu^3 - 4x\mu - 2\mu^3 + 4\mu^2 \tag{13}$$

$$+ x^4 + 2\mu x^2 - 2x^3 + 2\mu x^2 + 4\mu^2 - 4x\mu - 2x^3 - 4x\mu + 4x^2 \tag{14}$$

$$= x^4 - 4x^3 + 8x^2 + \mu^4 - 4\mu^3 + 8\mu^2 + 4\mu x^2 + 4x\mu^2 - 16x\mu \tag{15}$$

3 Conclusion

Voilà