

STATISTIQUE ET ANALYSE DES DONNÉES

ANESTIS ANTONIADIS

JACQUES BERRUYER

Régression vectorielle multiple à l'aide d'une généralisation multidimensionnelle de l'algorithme de Gauss-Newton

Statistique et analyse des données, tome 13, n° 3 (1988), p. 1-13.

http://www.numdam.org/item?id=SAD_1988__13_3_1_0

© Association pour la statistique et ses utilisations, 1988, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Statistique et analyse des données » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/legal.php>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

REGRESSION VECTORIELLE MULTIPLE
à l'aide d' une
Généralisation Multi-dimensionnelle de l'Algorithme de Gauss-Newton.

Anestis ANTONIADIS et Jacques BERRUYER

UNIVERSITÉ DE SAINT-ETIENNE

Laboratoire de Statistique

Faculté des Sciences et Techniques

23, rue du Docteur Paul Michelon

42023 Saint-Etienne cedex 02

Résumé: On dispose de n observations vectorielles y_1, \dots, y_n dans \mathbb{R}^k . Les observations sont entachées d'erreurs de mesure de précision variable. Plus précisément, on considère la situation modélisée par:

$$y_{j,i} = f_i(x_{j,i}^1, \dots, x_{j,i}^r; \beta_1, \dots, \beta_m) + \epsilon_{j,i} \quad \text{pour } 1 \leq i \leq k \text{ et } 1 \leq j \leq n$$

où les fonctions f_i sont supposées de forme analytique connue et les vecteurs ϵ_j de composantes $\epsilon_{j,i}$ sont des vecteurs aléatoires centrés, indépendants de même matrice de covariance Σ . Il s'agit d'estimer les paramètres inconnus β_1, \dots, β_m au vu des observations et de définir des régions de confiance pour ces paramètres. Le problème de régression multiple ainsi posé est résolu en termes bayésiens par la recherche d'un estimateur satisfaisant au critère d'estimation vectorielle de Box et Draper. L'optimisation est effectuée grâce à une généralisation de la méthode itérative de Gauss-Newton.

Abstract: This paper considers the problem of parameter estimation in multi-response regression models with several regressors. Box and Draper, through a Bayesian approach, derived an estimation criterion for such models. Given values of the responses and their derivatives with respect to the parameters, the optimisation problem is solved by a procedure which is similar to the Gauss-Newton method for nonlinear regression.

Mots clés: Régression vectorielle non linéaire, maximum a posteriori, algorithme de Gauss-Newton, décomposition Q-R.

Indices de classifications STMA: 07-130, 07-140, 07-160, 07-900.

Manuscrit reçu le 6 juillet 1988

Révisé le 17 octobre 1988

1. INTRODUCTION

Ingénieurs et physiciens sont souvent confrontés à des problèmes d'analyse de données multidimensionnelles. Ainsi, par exemple, lors de l'étude d'un monocristal en diffractométrie, l'un des types d'information recueilli est un ensemble mesuré de coordonnées de vecteurs de diffusion de module et de direction directement reliés aux dimensions de la maille élémentaire du cristal ainsi qu'à l'orientation de l'échantillon. Dans un tel cas, il n'est pas rare de vouloir estimer les angles d'orientation de l'échantillon.

Un tel problème d'estimation est généralement abordé par des méthodes classiques de régression multiple ne tenant compte ni des contraintes de type algébrique sur les composantes des observations vectorielles obtenues, ni des dépendances stochastiques éventuelles entre les erreurs de mesure et peut conduire à des difficultés ou à des conclusions erronées. C'est l'analyse d'un tel problème de cristallographie que nous a amené à étudier et à proposer dans la suite une méthode de régression vectorielle multiple sur échantillon vectoriel Gaussien à covariance inconnue.

On dispose de n observations vectorielles $\vec{y}_1, \dots, \vec{y}_n$ dans \mathbb{R}^k . La j -ième observation \vec{y}_j est l'enregistrement ou la mesure de k réponses distinctes. On admet que chacune des réponses est une fonction connue dépendant d'un certain nombre r de variables (régresseurs vectoriels) mesurées sans erreurs et d'un nombre m de paramètres inconnus.

Les observations sont entachées d'erreurs de mesure de précision variable. Cette situation est modélisée en écrivant :

$$y_{j,i} = f_i(x_{j,1}^1, \dots, x_{j,i}^r; \beta_1, \dots, \beta_m) + \epsilon_{j,i} \quad \text{pour } 1 \leq i \leq k \text{ et } 1 \leq j \leq n \quad (1.1)$$

où $y_{j,i}$ est la i -ième composante de l'observation vectorielle \vec{y}_j , ($x_{j,i}^q; 1 \leq q \leq r$) sont les valeurs des r variables contrôlées (mesurées sans erreurs), les fonctions f_i étant supposées de forme analytique connue et les vecteurs $\vec{\epsilon}_j$ de composantes $\epsilon_{j,i}$ étant des réalisations de vecteurs aléatoires centrés, indépendants et de même matrice de covariance Σ . De plus, précisons que les m paramètres inconnus ne figurent pas nécessairement tous dans chacune des k fonctions f_i .

Le modèle (1.1) est très général. Dans la plupart des cas pratiques des simplifications peuvent avoir lieu. Par exemple, il se peut qu'il n'y ait qu'une partie de l'ensemble des paramètres qui soit commune à toutes les réponses ou que les variables contrôlées soient linéairement liées.

Soit $\vec{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)$ le vecteur des paramètres inconnus intervenant dans les réponses du modèle (1.1). Au vu des observations, il s'agit d'estimer les paramètres inconnus $\vec{\beta}$ et de définir des régions de confiance pour ce paramètre.

On définit les quantités :

$$v_{j,p} = \sum_{i=1}^n [y_{i,j} - f_j(\vec{x}_{i,j}; \vec{\beta})][y_{i,p} - f_p(\vec{x}_{i,p}; \vec{\beta})] \quad (1.2)$$

qui ne sont autres que la somme des carrés et la somme des produits des écarts des $y_{i,j}$ observés à leurs moyennes théoriques respectives.

Supposons que les observations sont distribuées selon une loi vectorielle Gaussienne. Si la matrice de covariance Σ était connue, la fonction de vraisemblance de l'ensemble des observations serait une fonction monotone de la forme quadratique :

$$Q = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \sigma^{i,j} \mathbf{v}_{i,j} \quad \text{où } \Sigma^{-1} = \{\sigma^{i,j}\}_{1 \leq i \leq k, 1 \leq j \leq k}. \quad (1.3)$$

La minimisation de Q par rapport aux composantes $(\beta_1, \dots, \beta_m)$ peut être obtenue par la généralisation de la méthode des moindres carrés due à A. C. Aitken (cf. [1]). Une simplification supplémentaire a lieu lorsque la matrice Σ est supposée diagonale. En effet, dans ce dernier cas la minimisation de Q est équivalente à celle de l'expression suivante:

$$Q = \sum_{i=1}^k \sigma^{i,i} \mathbf{v}_{i,i} = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^k \frac{1}{\sigma^{i,i}} [y_{j,i} - f_i(\bar{x}_{j,i}, \vec{\beta})]^2. \quad (1.4)$$

C'est le type de fonction objective que l'on minimise par la méthode classique des moindres carrés pondérés.

Dans les cas (1.3) et (1.4) pour lesquels la matrice Σ est supposée connue, les algorithmes classiques de minimisation de fonctions permettent d'obtenir des résultats satisfaisants, que les réponses dépendent linéairement ou non des paramètres.

Malheureusement, dans la plupart des applications la matrice Σ est inconnue et c'est ce cas qui nous intéressera par la suite. La méthode qui consiste à minimiser les moindres carrés résiduels (voir par exemple W. E. Ball et al [2]) ne peut donner de bons résultats que si $\Sigma = \sigma^2 I$. En pratique, cette hypothèse est rarement satisfaite et une analyse des données sous une telle hypothèse conduit à des résultats erronés (cf. J. M. Eakman [8], J. Erjavec [9]). Lorsque Σ est quelconque et inconnue, G. E. P. Box et N. R. Draper [6] ont développé des techniques bayésiennes pour l'estimation des paramètres.

Ce travail s'adresse aux utilisateurs de techniques de régressions non linéaires. Au cours de notre exposé, nous rappellerons brièvement les fondements théoriques de ces méthodes statistiques.

2. ESTIMATION BAYESIENNE ET OPTIMISATION

Nous rappelons d'abord certaines notions de statistique bayésienne qui nous seront utiles ultérieurement. Le lecteur désireux de plus de détails se reportera à [3].

Nous supposons ici que l'espace des paramètres Θ est un sous ensemble mesurable de \mathbb{R}^m muni de sa tribu borélienne \mathcal{C} . Dans un modèle statistique bayésien, nous entendons par estimateur bayésien tout estimateur basé sur la loi a *posteriori* du paramètre θ . La loi a *priori* de θ reflète souvent des connaissances préliminaires sur les paramètres inconnus. Toutefois, il arrive qu'aucune valeur de θ ne soit prépondérante et, dans ce cas, il est naturel de prendre pour "distribution" a *priori*, une mesure proportionnelle à la mesure de Lebesgue sur l'espace mesuré (Θ, \mathcal{C}) . Lorsque l'espace Θ n'est pas de mesure finie, cette mesure a *priori* n'est pas une vraie probabilité mais est quand même appelée distribution a *priori* non informative. Elle permet en général d'obtenir pour loi a *posteriori* une vraie mesure de probabilité et nous continuerons à appeler estimateur du maximum a *posteriori* le mode, lorsqu'il existe, de cette loi a *posteriori*.

Avant de décrire le critère d'estimation de Box et Draper, nous allons introduire quelques notations supplémentaires.

Soit $H(\vec{\beta})$ la matrice réelle d'ordre $n \times k$ de terme général

$$h_{i,j} = f_j(\vec{x}_{i,j}; \vec{\beta}) \quad \text{pour } 1 \leq i \leq n \text{ et } 1 \leq j \leq k$$

où $\vec{x}_{i,j} \in \mathbb{R}^r$. L'élément $h_{i,j}$ représente la moyenne de la j -ième composante du i -ième vecteur observé.

En supposant que la densité, conditionnelle aux paramètres, du vecteur des observations est celle d'un échantillon gaussien, la fonction de vraisemblance conditionnelle des vecteurs $\vec{y}_1, \dots, \vec{y}_n$ observés est

$$L(\vec{y}_1, \dots, \vec{y}_n; \vec{\beta}, \Sigma) = (2\pi)^{-\frac{nk}{2}} (\det \Sigma)^{-\frac{n}{2}} \text{Exp} \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k \sigma^{i,j} v_{i,j} \right) \quad (2.1)$$

Partant de cette expression, Box et Draper utilisent dans [6] le Théorème de Bayes avec des pseudo-densités a *priori* pour $\vec{\beta}$ et Σ^{-1} . Plus précisément, sont choisies pour les paramètres, les pseudo-densités suivantes:

$$f_{\text{moy}}(\vec{\beta}) \propto d\vec{\beta} \quad \text{et} \quad f_{\text{var}}(\Sigma^{-1}) \propto (\det \Sigma)^{\frac{k+1}{2}} d\sigma^{i,j}.$$

En combinant (2.1) avec ces densités a *priori*, la densité a *posteriori* est proportionnelle à l'inverse du déterminant de la matrice V de terme général $[v_{i,j}]$. L'estimateur maximisant la densité a *posteriori* est alors la valeur du paramètre $\vec{\beta}$ pour laquelle le déterminant de $V = 'ZZ$ est minimum, où Z est la matrice résiduelle définie par

$$Z = [Y - H(\vec{\beta})],$$

et où Y désigne la matrice des vecteurs observés.

Remarquons ici que dans le cas unidimensionnel ($k = 1$), on obtient pour V l'expression

$$V = \sum_{j=1}^n (\tilde{y}_j - f(\tilde{x}_j; \tilde{\beta}))^2$$

qui n'est autre que la fonction à minimiser dans le cadre des moindres carrés classiques.

Dans l'article de Box et Draper [6], le bien fondé du critère bayésien retenu et décrit ci-dessus est analysé théoriquement, mais l'aspect numérique du problème d'optimisation posé n'est pas abordé. Pour résoudre ce dernier problème nous introduirons dans la suite une généralisation multidimensionnelle de l'algorithme de Gauss-Newton qui servira à minimiser une fonction objective du déterminant de V , adaptée aux dérivations matricielles.

L'estimateur $\tilde{\beta}$ du maximum *a posteriori* du vecteur $\tilde{\beta}$ des paramètres est choisi de manière à minimiser l'expression

$$\text{Det}(V) = \text{Det}({}^t Z Z) = \text{Det}({}^t [Y - H(\tilde{\beta})] [Y - H(\tilde{\beta})]). \quad (2.2)$$

Puisque la fonction logarithme est monotone, la minimisation de (2.2) par rapport à $\tilde{\beta}$ est équivalente à la minimisation de la fonction

$$g(\tilde{\beta}) = \frac{1}{2} \ln(\text{Det}({}^t Z Z)). \quad (2.3)$$

Nous nous proposons d'aborder cette minimisation en appliquant un algorithme itératif de minimisation de type Gauss-Newton sans contraintes. Rappelons que la méthode de Newton classique pour minimiser l'expression (2.3) consiste à résoudre à la k -ième itération le système

$$H^{(k)} \theta^{(k)} = -\dot{g}^{(k)} \quad \text{pour } \theta^{(k)},$$

et de poser

$$\tilde{\beta}^{(k+1)} = \tilde{\beta}^{(k)} + \alpha^{(k)} \theta^{(k)}$$

où $\alpha^{(k)}$ est un pas scalaire assurant une décroissance et où $H^{(k)}$ et $\dot{g}^{(k)}$ sont respectivement la matrice Hessienne (matrice des dérivées secondes) et le gradient de la fonction objective au point $\tilde{\beta}^{(k)}$ obtenu à l'itération k .

Le gradient de g par rapport à $\tilde{\beta}^{(k)}$ est donné par (cf D. Bates [4], formule (3.9), p. 374):

$$\frac{\partial g}{\partial \beta_j} = \text{Trace}(Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j}), \quad (2.4)$$

En utilisant, dans notre contexte, le Théorème 4.3 de Golub et Pereyra (cf [11]) sur le gradient d'une inverse généralisée, les éléments génériques de la matrice Hessienne de g sont:

def de Z+ (1.60 d MP?)

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \beta_i \partial \beta_j} = -\text{Trace}\left(Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j}\right) + \text{Trace}\left(Z^+ {}^t Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} (I - Z Z^+) \frac{\partial Z}{\partial \beta_i}\right) + \text{Trace}\left(Z^+ \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta_i \partial \beta_j}\right). \quad (2.5)$$

Comme dans la méthode de Gauss-Newton pour le cas des moindres carrés non linéaires classiques, nous allons négliger les dérivées du second ordre dans l'expression (2.5) des éléments de la matrice Hessienne. On obtient ainsi:

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \beta_i \partial \beta_j} \simeq -\text{Trace}\left(Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j}\right) + \text{Trace}\left(Z^+ {}^t Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} (I - Z Z^+) \frac{\partial Z}{\partial \beta_i}\right). \quad (2.6)$$

En remarquant que $\text{Det}({}^t Z Z) = \exp(2g(\vec{\beta}))$, on obtient pour le gradient et la matrice Hessienne de $\text{Det}({}^t Z Z)$, notés respectivement $\vec{\gamma}$ et Γ , les expressions suivantes:

$$\gamma_j = 2 \text{Det}({}^t Z Z) \frac{\partial g}{\partial \beta_j} \quad \text{et} \quad \Gamma_{ij} = 2 \text{Det}({}^t Z Z) \left[\frac{\partial^2 g}{\partial \beta_i \partial \beta_j} + 2 \frac{\partial g}{\partial \beta_i} \frac{\partial g}{\partial \beta_j} \right]. \quad (2.7)$$

Avec ces résultats, l'implémentation de l'algorithme que nous proposons se résume donc par le schéma itératif suivant:

$$\vec{\beta}^{(q+1)} = \vec{\beta}^{(q)} + \vec{\delta}^{(q)} \quad (2.8)$$

avec

$$\vec{\delta}^{(q)} = -\Gamma_q^{-1} \vec{\gamma}^{(q)} \quad (2.9)$$

où Γ_q est la matrice Hessienne à l'itération q et $\vec{\gamma}^{(q)}$ désigne le gradient de g en $\vec{\beta}^{(q)}$. Notons ici que le terme $\text{Det}({}^t Z Z)$ qui pourrait entraîner une instabilité numérique, ne figure pas en fait dans le calcul du vecteur de descente $\vec{\delta}$.

3. IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE

Une manière numériquement stable pour mettre en œuvre les calculs précédents est de former à chaque itération une décomposition QR de la matrice des résidus Z :

$$Z = Q\tilde{R}, \quad (3.1)$$

où Q est une matrice orthonormée d'ordre n et \tilde{R} est une matrice d'ordre $(n \times k)$, nulle en dessous de sa diagonale principale. Nous admettons que \tilde{R} est de rang k , puisque dans le cas contraire cela indiquerait que nous sommes en présence d'un minimum absolu pour la fonction à optimiser, ou, plus vraisemblablement, que certaines liaisons déterministes existent au niveau des données.

Grâce à la décomposition (3.1), le déterminant à minimiser devient

$$\text{Det}({}^tZZ) = \prod_{i=1}^k r_{i,i}^2, \quad (3.2)$$

et l'inverse généralisée de Moore-Penrose de la matrice Z

$$Z^+ = R^{-1}{}^tQ_1, \quad (3.3)$$

où Q_1 est la matrice d'ordre $(k \times n)$ formée des k premières colonnes de Q et R est la matrice triangulaire supérieure formée des k premières lignes de \tilde{R} .

On a ainsi :

$$Z = Q\tilde{R} = [Q_1 \quad Q_2] \cdot \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.4)$$

Avec cette décomposition, les expressions (2.4) et (2.5) pour le gradient et la matrice Hessienne de la fonction g deviennent:

$$\frac{\partial g}{\partial \beta_j} = \text{Trace}(Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j}) = \text{Trace}(R^{-1}{}^tQ_1 \frac{\partial Z}{\partial \beta_j}) = \text{Trace}({}^tQ_1 \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} R^{-1})$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial \beta_i \partial \beta_j} &= -\text{Trace}(Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} Z^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j}) + \text{Trace}(Z^+ {}^tZ^+ \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} Q_2 {}^tQ_2 \frac{\partial Z}{\partial \beta_i}) \\ &= -\text{Trace}({}^tQ_1 \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} R^{-1}{}^tQ_1 \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} R^{-1}) + \text{Trace}(Q_1 {}^tR^{-1} \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} Q_2 {}^tQ_2 \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} R^{-1}{}^tQ_1) \\ &= -\text{Trace}({}^tQ_1 \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} R^{-1}{}^tQ_1 \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} R^{-1}) + \text{Trace}({}^t[{}^tQ_2 \frac{\partial Z}{\partial \beta_j} R^{-1}] [{}^tQ_2 \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} R^{-1}]). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Posons $W_i = {}^tQ \frac{\partial Z}{\partial \beta_i} R^{-1}$. On obtient alors:

$$\frac{\partial g}{\partial \beta_j} = \sum_{q=1}^k \{W_i\}_{q,q}$$

et

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \beta_i \partial \beta_j} = - \sum_{q=1}^k \sum_{r=1}^k \{W_i\}_{q,r} \{W_i\}_{r,q} + \sum_{q=1}^k \sum_{r=k+1}^n \{W_i\}_{r,q} \{W_j\}_{r,q}.$$

Dans la méthode de Gauss-Newton du paragraphe 2, le calcul de la direction de descente résultant des équations (2.6) et (2.7) est implémenté en tenant compte des résultats précédents. Comme dans tous les algorithmes de type descente, cette méthode est sensible à l'initialisation des paramètres et peut conduire, dans le cas d'une mauvaise initialisation, à une matrice Hessienne de déterminant nul. Pour éviter cet écueil Gill et Murray (cf. [10]) ont proposé pour la résolution de l'équation (2.9) une factorisation de Cholesky modifiée de la matrice Γ du système. Cette factorisation coïncide avec celle obtenue par la méthode de Cholesky classique lorsque Γ est définie positive, mais modifie les éléments diagonaux de Γ lorsque ce n'est pas le cas. Dans l'exemple qui sera développé au §4, cette extension s'est avérée indispensable. Par ailleurs, pour l'algorithme de Gauss-Newton le pas dans la direction de descente de la fonction objective est généralement fixé à 1. Il n'est pas rare alors, lorsque le minimum est très localisé, de ne pas le reconnaître. Pour éviter cela, dans la direction de descente donnée, nous avons déterminé un pas admissible par une méthode naïve de dichotomie. Cela a suffi dans l'exemple que nous discuterons dans la suite. On pourrait envisager pour des cas plus délicats une recherche optimale du pas (méthodes linéaires ou méthode de Powell).

Enfin, comme dans tout problème d'optimisation itérative, il faut choisir un critère de convergence ou d'arrêt pour l'algorithme. Nous avons adapté à notre cas un critère tenant compte de la variabilité statistique de l'estimateur bayésien. Ce critère a été introduit pour la première fois par Bard (cf [3]) et a été repris plus tard par Bates et Watts (cf. [5]). Ainsi, nous déclarerons que la convergence a eu lieu lorsque

$$\frac{(n-m)}{2m \text{Det}({}^t Z Z)} \|C \vec{\delta}_q\|^2 < \epsilon^2,$$

où ϵ est un seuil de tolérance, fixé par exemple à 0,001, et où C est la matrice triangulaire supérieure obtenue par la décomposition de Cholesky de Γ à l'itération q .

Finalement, d'après les résultats de Box et Draper, une région de confiance a *posteriori* pour les paramètres au niveau α est obtenue par :

$${}^t(\vec{\beta} - \vec{\hat{\beta}}) \Gamma (\vec{\beta} - \vec{\hat{\beta}}) \leq 2m s^2 \text{FS}_{m,n-m}^{-1}(1-\alpha)$$

où $\text{FS}_{m,n-m}$ est la fonction de répartition de la loi de Fisher-Snedecor à m et $(n-m)$ degrés de liberté et $s^2 = (n-m)^{-1} \text{Det}({}^t Z Z)$.

4. UN EXEMPLE D'APPLICATION

L'étude de la maille d'un cristal, dans une expérience de diffraction, passe par la détermination des angles de rotation qui permettront d'amener le cristal dans une orientation souhaitée.

Le problème peut se résumer de la manière suivante :

Lors d'une expérience classique de diffraction sur monocristal, les grandeurs mesurées constituent une suite de couples $(\theta_{h_1 h_2 h_3}, I_{h_1 h_2 h_3})$ avec :

- $h_1 h_2 h_3$: les indices de Miller (composantes) du vecteur normal \vec{N} à une famille de plans réticulaires du réseau cristallin, d'espacement $d_{h_1 h_2 h_3}$ dans le référentiel oblique de la maille élémentaire de paramètres $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, a_1, a_2, a_3$.
- $\theta_{h_1 h_2 h_3}$: le demi angle entre le faisceau diffracté par le plan cristallin $h_1 h_2 h_3$ et le faisceau incident.
- $I_{h_1 h_2 h_3}$: l'intensité du faisceau diffracté.

Il est donc essentiel pour le physicien de connaître avec précision l'orientation des axes cristallins (a_i) dans le référentiel du laboratoire afin de pouvoir amener les plans $h_i h_j h_k$ souhaités en position de diffraction.

Parmi les diverses méthodes classiques de détermination de l'orientation d'un cristal-échantillon nous empruntons l'exemple ci-après au cas de la technique dite de Laue (Cf. J. Laugier et A. Filhol [12]). La maille du cristal-échantillon est supposée connue; seules nous importent ici les directions des vecteurs $h_i h_j h_k$ déduites des $\theta_{h_i h_j h_k}$ mesurés.

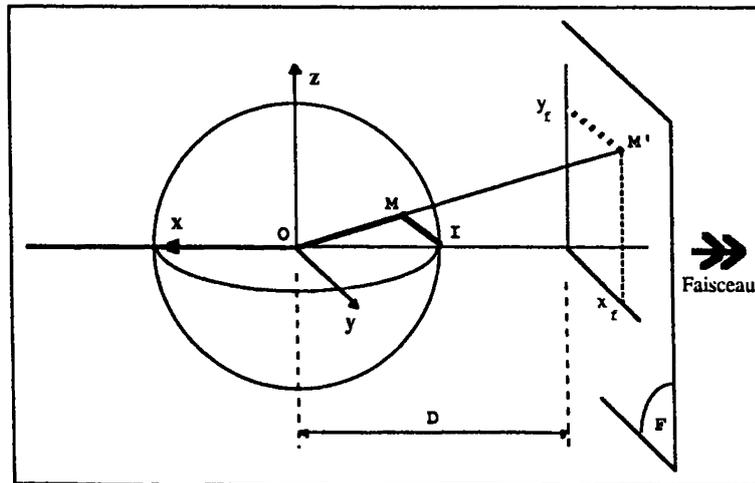


Figure 1. Géométrie de diffraction.

De manière plus détaillée, soient F le plan d'un film photographique, E un cristal-échantillon situé à une distance D de F , \vec{N} la normale à une famille de plans réticulaires d'espacement d_{h_i, h_j, h_k} , d'origine I et d'extrémité M sur la sphère d'Ewald de rayon unité. Notons M' la tache de diffraction correspondante de coordonnées x_f et y_f sur le film F centré en O (voir figure 1).

Le vecteur $I\vec{M}$ est repéré sans erreur dans un repère orthonormé lié au cristal par ses coordonnées (x_2, y_2, z_2) , données par :

$$\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^* & a_2^* \cos \alpha_3^* & a_3^* \cos \alpha_2^* \\ 0 & a_2^* \sin \alpha_3^* & -a_3^* \sin \alpha_2^* \cos \alpha_1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_3} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{bmatrix}$$

où les paramètres (a_i, α_i) (resp. (a_i^*, α_i^*)) sont des paramètres directs (resp. réciproques) de la maille du cristal, supposés connus et constants au cours de l'expérience, et où $x_1 = h_1 d_{h_1, h_2, h_3}$, $y_1 = h_2 d_{h_1, h_2, h_3}$ et $z_1 = h_3 d_{h_1, h_2, h_3}$ sont variables mais mesurés sans erreur. A partir des diverses valeurs des variables contrôllées x_2, y_2, z_2 on calcule les coordonnées de $I\vec{M}$ dans le repère orthonormé lié à l'expérience selon:

$$\begin{bmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{bmatrix} = \Phi(\phi) \cdot \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix}, \quad (4.1)$$

où la matrice d'orientation $\Phi(\phi)$ est définie par:

$$\begin{bmatrix} \cos \phi_2 \cos \phi_3 & \cos \phi_1 \sin \phi_3 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi_3 & \sin \phi_1 \sin \phi_3 + \cos \phi_1 \sin \phi_2 \sin \phi_3 \\ -\cos \phi_2 \sin \phi_3 & \cos \phi_1 \cos \phi_3 + \sin \phi_1 \sin \phi_2 \sin \phi_3 & \sin \phi_1 \cos \phi_3 - \cos \phi_1 \sin \phi_2 \sin \phi_3 \\ -\sin \phi_2 & -\sin \phi_1 \sin \phi_3 & \cos \phi_1 \cos \phi_2 \end{bmatrix}$$

La relation précédente est la relation théorique qu'il y a entre les coordonnées respectives du vecteur $I\vec{M}$. En pratique les angles ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 sont inconnus et x_3, y_3, z_3 sont calculés à partir des coordonnées x_f et y_f des taches de diffraction et sont entachés d'erreurs aléatoires (erreurs de lecture, décalage d'origine, erreur sur D). Plus précisément, pour diverses valeurs des variables contrôllées, on mesure:

$$\begin{bmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(\frac{D}{V} + S) \\ x_f \\ y_f \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

avec $V = \sqrt{x_f^2 + y_f^2 + D^2}$ et $S = 1$ ou $S = -1$ selon que l'on effectue l'expérience en position de réflexion ou en position de transmission (film placé devant ou derrière l'échantillon).

Le problème statistique posé est d'estimer au mieux les angles inconnus ϕ_1 , ϕ_2 et ϕ_3 de la matrice d'orientation $\Phi(\phi)$. Ce problème rentre dans le cadre du modèle de régression vectorielle multiple que nous avons développé, en prenant:

- $k = r = m = 3$
- n = nombre de taches distinctes mesurées
- $f_1 = x_{3th}$, $f_2 = y_{3th}$, $f_3 = z_{3th}$ où les composantes théoriques x_{3th} , y_{3th} , z_{3th} sont définies par l'expression (4.1)
- $\vec{y}_j = [x_{3obs}, y_{3obs}, z_{3obs}]$ où x_{3obs} , y_{3obs} , z_{3obs} sont les coordonnées de la j -ième tache observée (expression (4.2))
- $\beta_i = \phi_i$, $1 \leq i \leq 3$.

Après avoir calculé analytiquement les gradients des réponses f_1 , f_2 et f_3 par rapport aux paramètres β_i , nous avons appliqué l'algorithme développé au §3 à des données réelles observées lors d'une expérience de diffraction de type Laue effectuée au Centre d'Étude Nucléaires de Grenoble. L'ensemble des observations est résumé ci-dessous.

Plan d'expérience

<i>Régresseur 1</i>			<i>Régresseur 2</i>			<i>Régresseur 3</i>		
0.20044	0.20044	0.20044	-0.82412	-0.82412	-0.82412	-0.52977	-0.52977	-0.52977
0.44812	0.44812	0.44812	-0.75200	-0.75200	-0.75200	0.48341	0.48341	0.48341
0.59051	0.59051	0.59051	0.49548	0.49548	0.49548	0.63702	0.63702	0.63702
0.28616	0.28616	0.28616	0.58828	0.58828	0.58828	-0.75633	-0.75633	-0.75633
0.59051	0.59051	0.59051	-0.49548	-0.49548	-0.49548	0.63702	0.63702	0.63702
0.67983	0.67983	0.67983	0.00000	0.00000	0.00000	0.73337	0.73337	0.73337
0.28616	0.28616	0.28616	-0.58828	-0.58828	-0.58828	-0.75633	-0.75633	-0.75633
0.35387	0.35387	0.35387	0.00000	0.00000	0.00000	-0.93529	-0.93529	-0.93529
0.45800	0.45800	0.45800	0.84631	0.84631	0.84631	-0.27202	-0.27202	-0.27202
0.20531	0.20531	0.20531	-0.97870	-0.97870	-0.97870	0.00000	0.00000	0.00000

Les vecteurs observés

0.42721	-0.56482	0.70603
0.45760	0.45760	0.75086
0.36550	0.36550	-0.46371
0.32830	-0.61521	-0.71675
0.52470	0.68511	0.50527
0.51340	0.85786	0.02303
0.51690	-0.74081	0.42895
0.52350	-0.83323	-0.17809
0.35830	-0.07259	-0.93077
0.35360	-0.06627	0.93303

Pour initialiser l'algorithme de minimisation on doit fournir des valeurs initiales raisonnables pour les angles β_1 , β_2 et β_3 . De telles valeurs nous ont été fournies par un logiciel de prétraitement des données de l'expérience (cf. [12]). Pour l'exemple analysé nous avons pris pour ces angles initiaux (exprimés en degrés): $\beta_1 = 83.00$, $\beta_2 = 6.00$ et $\beta_3 = -11.00$. Pour ces valeurs initiales, la fonction à minimiser vaut 0.2118439×10^{-8} et le critère d'arrêt 0.7636429. La convergence a eu lieu au bout de 16 itérations, après lesquelles la fonction à minimiser vaut 0.543×10^{-12} pour un critère d'arrêt égal à 6×10^{-7} .

Enfin, les paramètres estimés en degrés sont: $\hat{\beta}_1 = 81.560$, $\hat{\beta}_2 = 7.593$ et $\hat{\beta}_3 = -12.485$, avec pour écart-types respectifs 0.121, 0.051 et 0.084. Les régions de confiance pour les paramètres découlent de la dernière formule du paragraphe 3. La matrice d'orientation ainsi estimée s'est avérée satisfaisante pour le cristallographe.

Bien que la généralisation de la méthode de Gauss-Newton donne en général des résultats satisfaisants, cela n'exclut pas qu'elle puisse présenter des lacunes analogues à celles rencontrées dans le cadre de la régression scalaire classique. Remarquons ici que le critère introduit requiert deux contraintes sur le nombre des observations vectorielles. Il faut d'abord que $n \geq k$ pour que le déterminant ne soit pas nul. Il faut également que $n > m$ sinon le déterminant pourrait être rendu nul en ajustant de manière exacte n'importe laquelle des réponses f_i , et ceci aboutirait à l'obtention de k minimum locaux. Pour déterminer la présence éventuelle de minimums multiples, on pourra initialiser l'algorithme avec des points de départ différents et voir si l'on converge vers le même point stationnaire. Pour détecter des singularités dans les observations, on pourra utiliser des décompositions en vecteurs et valeurs propres de la matrice Z préconisées dans [7].

Comme toutes les méthodes de type descente, notre méthode peut converger sur des minimums locaux et ne pas détecter le minimum global de la fonction objective $\text{Det}({}^tZZ)$. Dans ce cas on pourrait envisager d'aborder le problème de la minimisation par des méthodes d'optimisation de type recuit simulé (cf [13]). L'avantage de ce type de méthodes est leur capacité d'immigrer d'un minimum local à l'autre dans la recherche de la solution globale et de reconnaître le minimum global lorsque ce dernier a été localisé. Le désavantage est qu'il est en général très difficile d'estimer la vitesse optimale de "refroidissement" et que le temps de calcul nécessaire pour l'optimisation est sans rapport avec celui des méthodes de type descente. Remarquons enfin que malgré le fait que notre principe d'estimation repose sur l'hypothèse Gaussienne, il permet encore, même sans cette hypothèse, de définir un estimateur par minimisation de la même fonction objective.

Remerciements.

Les auteurs tiennent à adresser leurs remerciements à Messieurs A. Filhol et G. Laugier pour leur avoir suggéré le problème et pour les conversations qu'ils ont eu ensemble, ainsi

que le service DRF / SPH du Centre d'Études Nucléaires de Grenoble qui a financé en partie ce travail. Leurs remerciements s'adressent également aux rapporteurs qui par leurs remarques et suggestions ont permis d'améliorer la présentation de ce travail.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] AITKEN, A. C. *On least squares and linear combination of observations*, Proc. Roy. Soc. Edin., (1935), Vol. 55, pp. 42.
- [2] BALL, W. E. et GROENWEGHE, L. C. D. *Determination of best-fit rate constants in chemical kinetics*, Ind. & Eng. Chem. Fundamentals, (1966), Vol. 5, pp. 181.
- [3] BARD, Y. *Nonlinear parameter estimation*, Academic Press, 1974.
- [4] BATES, D. M. *The derivative of $|X'X|$ and its uses*, Technometrics, (1983), Vol. 25, pp. 373-376.
- [5] BATES, D. M. et WATTS, D. G. *A relative offset orthogonality criterion for nonlinear least squares*, Technometrics, (1981), Vol. 23, pp. 179-183.
- [6] BOX, G. E. P. et DRAPER, N. R. *Bayesian estimation of common parameters from several responses*, (1965), Biometrika, Vol. 52, pp. 355-365.
- [7] BOX, G. E. P., HUNTER, W. G., MACGREGOR, J. F. et ERJAVEC, J. *Some Problems Associated with the Analysis of Multiresponse Data*, (1965), Biometrika, Vol. 52, pp. 355-365.
- [8] EAKMAN, J. M. *Strategy for estimation of rate constants from Isothermal reaction data*, (1969), Ind. & Eng. Chem. Fundamentals, Vol. 8, pp. 53-58.
- [9] ERJAVEC, J. *Strategy for estimation of rate constants from Isothermal reaction data*, (1970), Ind. & Eng. Chem. Fundamentals, Vol. 9, pp. 187-191.
- [10] GILL, P. E. et MURRAY, W. *Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained optimization*, (1974), Mathematical Programming, Vol. 7, pp. 311-350.
- [11] GOLUB, G. H. et PEREYRA, V. *The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate*, (1973), SIAM J. Numer. Anal., Vol. 10, pp. 413-432.
- [12] LAUGIER, J. et FILHOL, A. *An interactive program for the interpretation and simulation of Laue Patterns*, (1983), J. Appl. Cryst., Vol. 16, pp. 281-283.
- [13] MARCHESI, M. et al. *Minimizing multimodal functions of continuous variables with the simulated annealing algorithm*, (1987), ACM Trans. Math. Software, Vol. 13, pp. 262-280.