

NOTES DE STATISTIQUE ET D'INFORMATIQUE

2014/1

INTRODUCTION AUX PROBLÈMES INVERSES

C. CHARLES

Université de Liège – Gembloux Agro-Bio Tech
*Unité de Statistique, Informatique et Mathématique
appliquées à la bioingénierie*
GEMBLOUX
(Belgique)

INTRODUCTION AUX PROBLEMES INVERSES

C. CHARLES *

RÉSUMÉ

Cette note technique est une initiation aux problèmes inverses. Son objectif est d'expliquer au lecteur ses principes généraux, de montrer son large panel d'applications ainsi que de présenter ses méthodes de résolution les plus courantes.

SUMMARY

This note aims to introduce inverse problems. The objective is to describe its principles, to make known its numerous applications and to introduce its different methods of resolution.

1. INTRODUCTION

Un problème *inverse* consiste à déterminer des causes à partir de la connaissance des effets. Ce problème est l'inverse du problème dit *direct*, consistant à déduire les effets à partir de la connaissance des causes, ce à quoi nous sommes plus souvent habitués [KERN, 2002]. Par exemple, localiser l'origine d'un tremblement de terre à partir de mesures faites par plusieurs stations sismiques réparties sur la surface du globe terrestre est un problème inverse. Le problème d'identification de sources de pollution à partir d'un faible nombre de mesures de concentrations en est un autre.

Parmi les domaines dans lesquels les problèmes inverses jouent un rôle important, nous pouvons entre autres citer [ROUSSEL, 2011] :

- l'imagerie médicale (échographie, scanners, rayons X)
- l'ingénierie pétrolière (prospection par des méthodes sismiques, magnétiques, identification des perméabilités dans un réservoir)

*Chargée de cours à l'ULg Faculté des Sciences agronomiques de Gembloux (Unité de Statistique, Informatique et Mathématique appliquées)

- l'hydrogéologie (identification des perméabilités hydrauliques)
- la chimie (détermination des constantes de réaction)
- le radar et l'acoustique sous-marine (détermination de la forme d'un obstacle)
- le traitement d'image (restauration d'images floues).

Par la définition d'un problème inverse donnée ci-dessus, nous pouvons voir que les problèmes inverses risquent de poser des difficultés. En effet, il est raisonnable d'exiger qu'un problème direct soit bien posé : "les mêmes causes produisent les mêmes effets". Par contre, il est facile d'imaginer que les mêmes effets puissent provenir de causes différentes. Ceci illustre une difficulté de l'étude des problèmes inverses : ils peuvent avoir plusieurs solutions, et il est nécessaire de disposer d'informations supplémentaires pour choisir celle qui correspond à notre problème [KERN, 2002].

Une autre difficulté de l'étude des problèmes inverses est qu'elle demande souvent une bonne connaissance du problème direct, ce qui se traduit par le recours pour sa résolution à des éléments spécifiques à chaque problème traité. Ceci balaie donc l'idée d'une grande méthode "miracle" valable pour tous les problèmes inverses. Il existe toutefois quelques techniques qui possèdent un domaine d'applicabilité étendu. Celles-ci font l'objet de cette note.

Du point de vue mathématique, ces problèmes se répartissent en deux grands groupes. D'une part, il y a les problèmes *linéaires* qui se ramènent à la résolution d'une équation intégrale de première espèce dans le cas continu ou à la résolution d'un système dans le cas discret. Le recours à l'analyse fonctionnelle et à l'algèbre linéaire permet d'obtenir des résultats précis et des algorithmes efficaces. D'autre part, il y a les problèmes *non-linéaires*, qui sont le plus souvent des questions d'estimation de paramètres dans des équations différentielles ou aux dérivées partielles. Les problèmes non-linéaires peuvent se diviser en deux catégories selon que le paramètre que l'on cherche à estimer est un vecteur ou une fonction. Les problèmes non-linéaires sont plus difficiles, et il existe moins de résultats généraux [KERN, 2002].

1.1. Plan

Après cette introduction, le paragraphe 2 reprend les notions de base des problèmes inverses. Le paragraphe 3 s'intéresse à différents domaines d'applications de ceux-ci. Avant de conclure, les paragraphes 4, 5 et 6 expliquent les méthodes de résolution les plus usitées.

2. PRINCIPES GENERAUX

2.1. Définition

Un grand nombre de problèmes réels en sciences expérimentales consiste à déterminer une grandeur non directement observable $x(r)$ à partir d'un ensemble fini de mesures d'une grandeur observée $y(u)$ dépendant de paramètres θ selon le modèle $M(y(u), x(r), \theta) = 0$. Parfois le modèle est explicite : $y(u) = M(x(r), \theta)$. Nous pouvons dire que

- connaissant M, θ, x , le calcul de y est un problème direct.
- connaissant M, θ, y , le calcul de x est un problème inverse.
- connaissant M, x, y , le calcul de θ est un problème inverse d'identifications de paramètres.
- connaissant M, y , le calcul de θ et x est un problème inverse aveugle.

Ces problèmes étant sensibles à la présence d'incertitudes au niveau du modèle et des mesures, il est plus réaliste d'écrire $M(y, x, \theta, e) = 0$ où e représente les erreurs communément appelé bruit. Pour un modèle explicite, on peut faire l'hypothèse que les erreurs interviennent à la sortie et si les erreurs sont additives, on a $y = M(x, \theta) + e$ [ROUSSEL, 2011].

Si M est un opérateur linéaire, la relation peut s'écrire soit comme $y = Mx + e$ où M est une matrice dans le cas discret, soit comme une intégrale de Freedholm dite de première espèce $y(u) = \int x(r)h(r, u)dr + e(u)$ où $h(r, u)$ est appelé noyau de Green ou fonction instrumentale dans le cas continu. Cette intégrale se discrétise, par quadrature par exemple, en $y = Mx + e$ où M est une matrice.

2.2. Cas particulier : la déconvolution

Intéressons-nous de plus près à un cas particulier. Lorsque $h(r, u) = h(r - u)$, le modèle est invariant par translation et on obtient une intégrale dite de convolution $y(u) = \int x(r)h(r - u)dr + e(u)$. Cette intégrale est notée de façon plus concise $y = x * h + e$. La fonction h est alors appelée réponse impulsionnelle et le problème inverse problème de déconvolution.

Afin de mieux appréhender ce problème de déconvolution, imaginons un capteur ou un instrument de mesure. Celui-ci serait idéal si la sortie $y(t)$ était proportionnelle à la grandeur mesurée $x(t)$: on aurait $y(t) = ax(t) \forall t, a \in \mathbb{R}$ et $x(t)$ serait facilement retrouvé comme $\frac{y(t)}{a}$ (voir figure 2). Or souvent, le capteur n'est pas idéal et possède une réponse instrumentale traduite par sa réponse impulsionnelle $h(t, \tau) = h(t - \tau)$, et $y(t) = \int h(t - \tau)x(\tau)d\tau$ (voir figure 1). La réponse impulsionnelle d'un capteur parfait est en réalité $h(t) = a\delta(t)$ avec δ la fonction de Dirac car il permet d'obtenir $y(t) = ax(t)$ tandis que celle d'un capteur imparfait n'est pas proportionnelle à la fonction de Dirac. Dans ce cas, pour connaître une estimation du signal physique réel $x(t)$, on doit déconvoluer

le signal $y(t)$ par $h(t)$ au moyen de méthodes décrites dans la section 4.

Si le produit de convolution de deux fonctions continues se note $x * h = \int x(\tau)h(t - \tau)d\tau$, la version discrète appelée convolution circulaire est définie comme $\sum_{k=0}^{n-1} x(k)h((j - k)_{\text{mod } n})$ pour $x, h \in \mathbb{R}^n$. Ce produit de convolution peut se réécrire Hx avec $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matrice circulante dont la première colonne est h i.e.

$$H = \begin{pmatrix} h(0) & h(n-1) & \dots & h(2) & h(1) \\ h(1) & h(0) & h(n-1) & \dots & h(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ h(n-1) & h(n-2) & \dots & h(1) & h(0) \end{pmatrix}.$$

Ce problème inverse linéaire se transforme donc bien en une résolution de système, comme mentionné à la fin du paragraphe 2.1.

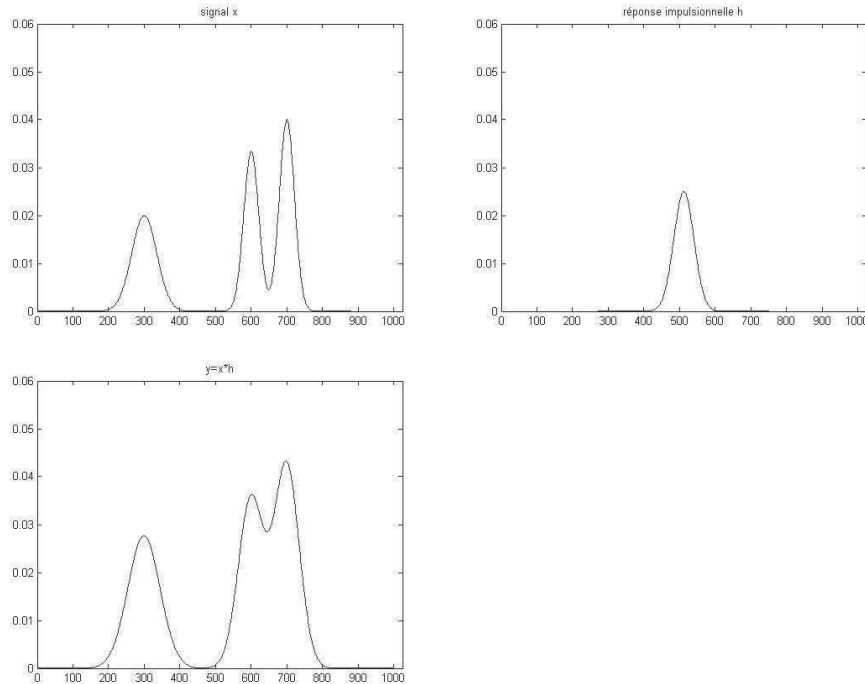


Figure 1. Illustration d'une convolution avec une réponse impulsionnelle imparfaite. En haut à gauche : $x(t)$, en haut à droite : $h(t)$, en bas à gauche $y = x * h$.

2.3. Problème mal posé

En 1923, Hadamard a introduit la notion de problème bien posé. Il s'agit d'un problème dont :

- la solution existe
- la solution est unique
- la solution dépend continûment des données.

Un problème qui n'est pas bien posé au sens de la définition ci-dessus est dit mal posé.

Les problèmes inverses ne vérifient souvent pas l'une ou l'autre de ces conditions, voire les trois ensemble. Cela n'est pas surprenant pour plusieurs raisons. Tout d'abord, un modèle physique étant fixé, les données expérimentales dont on dispose sont en général bruitées, et rien ne garantit que de telles données bruitées proviennent de ce modèle, même pour un autre jeu de paramètres. Ensuite, si une solution existe, il est parfaitement concevable que des paramètres différents conduisent aux mêmes observations [KERN, 2002].

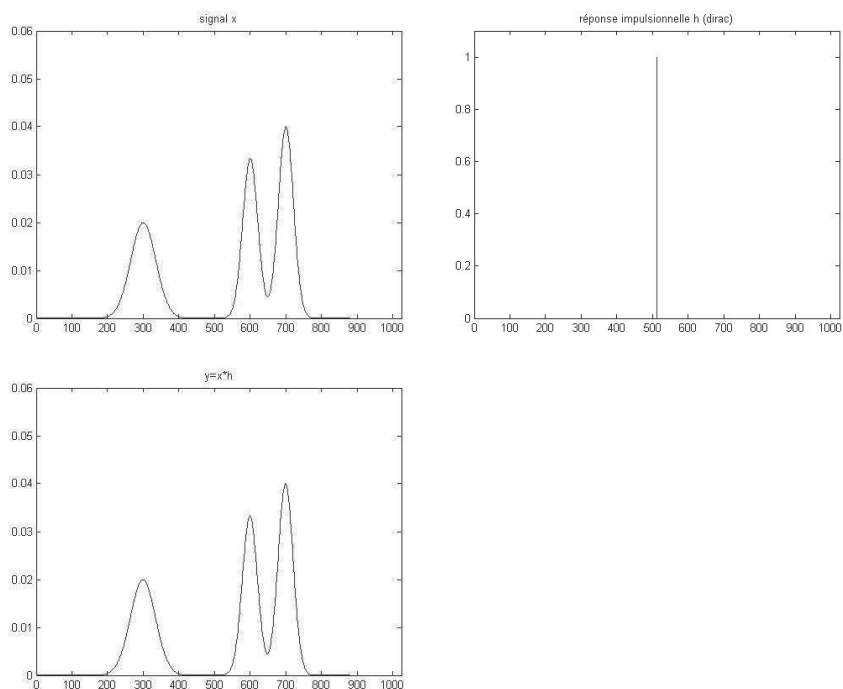


Figure 2. Illustration d'une convolution avec une réponse impulsionnelle parfaite. En haut à gauche : $x(t)$, en haut à droite : $h(t)$, en bas à gauche $y = x * h$.

Analysons les trois conditions d'un problème bien posé dans le cas des problèmes inverses. Premièrement, le fait que la solution d'un problème inverse puisse ne pas exister n'est pas une grande difficulté. Il est habituellement possible de rétablir l'existence en relaxant la notion de solution. Par exemple, dans le cas d'un système linéaire surdéterminé $Ax = b$, en redéfinissant le problème avec moins d'équations ou en cherchant la solution au sens des moindres carrés (i.e. x tel que $\|Ax - b\|^2$ soit la plus petite). Deuxièmement, la non-unicité est un problème un peu plus sérieux. Si un problème a plusieurs solutions, il faut un moyen de choisir entre elles. Pour cela, il faut disposer d'informations supplémentaires (une information a priori). Troisièmement, le manque de continuité est sans doute le plus problématique, en particulier en vue d'une résolution approchée ou numérique. Prenons pour exemple la résolution du système suivant $Ax = b$:

$$\begin{cases} 12x_1 + 11x_2 = 23 \\ 13x_1 + 12x_2 = 25 \end{cases} .$$

Ce système a pour solution $x_1 = 1$ et $x_2 = 1$. Si on introduit une perturbation dans la matrice des coefficients, on obtient par exemple

$$\begin{cases} 12.05x_1 + 11x_2 = 23 \\ 13x_1 + 11.95x_2 = 25 \end{cases}$$

qui a pour solution $x_1 = -0.15$ et $x_2 = 2.25$, solution fort différente de la précédente. Une petite perturbation de A entraîne une grande perturbation de x . Ce problème est donc mal posé car la troisième condition n'est pas satisfaite. Dans ce cas-ci, on dit que la matrice A est mal conditionnée. Afin de savoir si la matrice d'un système est bien conditionnée, la notion de conditionnement d'une matrice a été introduite. Le conditionnement d'une matrice A est définie comme $\|A\|\|A^{-1}\|$. Il y a différents conditionnements en fonction de la norme matricielle choisie. Le conditionnement habituel est le conditionnement associé à la norme euclidienne. On peut montrer qu'il vaut le rapport de la plus grande valeur singulière de la matrice A sur sa plus petite valeur singulière. Pour rappel, les valeurs singulières d'une matrice A sont les racines carrées des valeurs propres de $A^T A$. Si A est symétrique semi-définie positive, les valeurs singulières et valeurs propres sont égales. Un conditionnement grand entraîne que le système est mal conditionné et donc le problème mal posé. Dans notre exemple, le conditionnement de la matrice des coefficients est proche de 578, ce qui montre que le problème est mal posé.

3. APPLICATIONS

Dans ce paragraphe, nous décrivons succinctement quelques contextes d'applications.

3.1. Diffusion des polluants

Dans le cas supposé d'une pollution industrielle, les phénomènes physiques qui interviennent dans le transport du polluant sont modélisés par une équation aux dérivées partielles à coefficients constants (appelée équation de convection-dispersion). Pour un milieu bidimensionnel infini sans profondeur, la concentration $c(x, y, t)$ et la source sous la forme de son débit $f(x, y, t)$ vérifient une équation aux dérivées partielles dont la solution avec des conditions initiales et aux limites nulles s'exprime comme un produit de convolution $c = h * f$ où h est la réponse impulsionnelle connue. La concentration n'est mesurée en réalité qu'en un nombre limité de points correspondant au nombre de capteurs disponibles, localisés en (x_p, y_p) . Chaque capteur effectue N_p mesures temporelles conduisant aux concentrations effectivement mesurées c_{p,n_p} . L'enjeu est donc d'estimer la fonction f à partir de l'équation de convolution, des concentrations mesurées c et de la réponse impulsionnelle h . Nous sommes face à un problème inverse non aveugle, plus précisément un problème de déconvolution non aveugle à plusieurs dimensions [HAZART ET AL., 2005].

3.2. Sciences de la terre

Le but est d'établir une cartographie des hétérogénéités du sous-sol décrites généralement par la vitesse de propagation des ondes sismiques. La propagation des ondes sismiques dans le sous-sol est en général provoquée par des sources artificielles (généralement des sources explosives) activées à des temps et des positions contrôlées. Les ondes sismiques sont enregistrées par un dispositif de capteurs situé à la surface de la terre ou au fond de la mer. Les capteurs enregistrent l'arrivée des différentes ondes sismiques au cours du temps sous forme d'une série temporelle appelée sismogramme. La numérisation des temps d'arrivée des ondes sismiques sur les sismogrammes fournit un ensemble d'observations représentant une mesure indirecte des propriétés du sous-sol (vitesse de propagation des ondes). Il s'agit donc d'un problème inverse : retrouver les propriétés du sous-sol à partir des sismogrammes [MONTEILLER, 2011].

3.3. Imagerie

1. Tomographie

Regardons de manière simplifiée comment fonctionne la tomographie à Rayons X. L'objet à analyser est décomposé de manière théorique en "pixels". Il est donc divisé en m lignes et n colonnes, ce qui fait $m \times n$ pixels, tous caractérisés par un coefficient d'atténuation du rayon X. Le but est de retrouver ces coefficients. En envoyant un faisceau de rayons X sur l'objet dans une direction précise, par exemple le long des lignes, chacun des m détecteurs mesure l'intensité après propagation du rayon le long des lignes, i.e. après avoir traversé n pixels. Nous avons ainsi m mesures. La

même opération est réalisée n fois avec des angles différents. Nous obtenons $m \times n$ mesures dépendant de nos $m \times n$ coefficients d'atténuation à trouver. C'est un problème inverse.

De manière tout à fait générale et théorique, le but de la tomographie est de reconstruire une fonction f à partir des observations de ses intégrales sur des hyperplans. Ce problème de reconstruction apparaît dans de nombreux domaines, de l'imagerie médicale à la théorie du radar, en passant par la géophysique. L'un des premiers cas où ce principe est apparu est la radiologie par utilisation de rayons-X. Le principal outil mathématique utilisé pour la tomographie est la transformation de Radon, qui à une fonction f fait correspondre les intégrales sur des hyperplans. La transformée de Radon d'une fonction f est définie par

$$Rf(s, u) = \int_{w: \langle w, s \rangle = u} f(w) dw,$$

où $u \in \mathbb{R}$, $s \in S^{d-1}$ est la sphère unité et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire de \mathbb{R}^d . Ainsi, $Rf(s, u)$ est l'intégrale sur l'hyperplan défini par (s, u) . La tomographie est un problème inverse mal-posé où l'opérateur à inverser est la transformation de Radon. Notons qu'il existe de très nombreux modèles différents, qui dépendent du domaine considéré et de la complexité désirée dans la modélisation [CAVALIER, 2003].

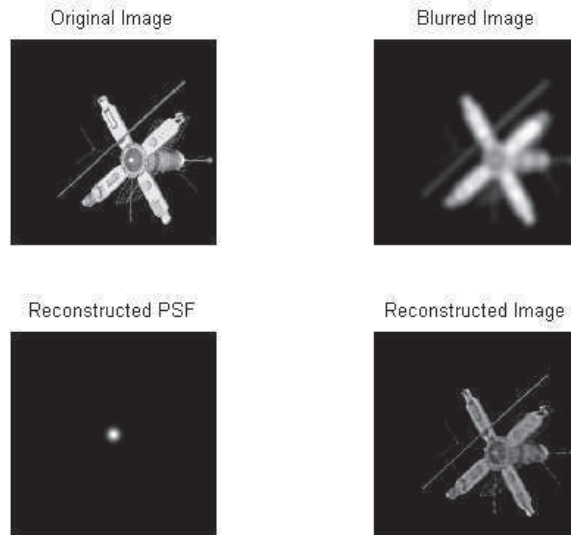


Figure 3. Déconvolution d'image. En haut à gauche x , en haut à droite y , en bas une estimation de h (à gauche) et de x (à droite) par un algorithme de déconvolution aveugle [LECHARLIER ET AL., 2013].

2. *Restauration d'image*

Les images numériques obtenues sont souvent dégradées par un bruit additif et un opérateur (flou). L'opérateur de flou donne une image observée y , modélisée par une convolution discrète bidimensionnelle $y(i, j) = \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{l=0}^{n-1} x(k, l)h((i-k)_{\text{mod } n}, (j-l)_{\text{mod } n})$. A partir de y , on cherche à retrouver x . C'est donc un problème de déconvolution aveugle à deux dimensions. Une illustration se trouve en figure 3 [LECHARLIER ET AL., 2013].

3.4. Spectroscopie

Le problème est ici d'analyser des substances multi-composantes par technique spectroscopique. En fait, chaque observation est une combinaison linéaire de différents spectres purs (associés à différents composants). Les observations obtenues ont été acquises dans des conditions différentes (physico-chimiques, temporelles, spatiales). L'objectif est d'identifier les composants purs et d'évaluer leurs concentrations dans ces différentes observations. La figure 4 illustre trois mélanges de deux composants purs. Dans la colonne de gauche se trouvent les mélanges et dans la colonne de droite les composants purs qui ont servi à composer les mélanges. Ces mélanges sont obtenus de la façon suivante. Le premier contient 2/3 du composant 1 et 1/3 du composant 2 ; le deuxième mélange contient la moitié de chaque composant ; et le troisième est constitué d'1/3 du composant 1 et de 2/3 du composant 2.

De manière générale, ce problème est un problème de séparation de mélanges positifs de sources positives $Y = MX$. On a Y , matrice des mélanges observés ($m \times n$). Chacune de ses lignes correspond à une observation (mélange). On a M , matrice de mélange à estimer ($m \times p$). Chacune de ses lignes correspond à un profil de concentration. On a enfin X matrice des sources à estimer ($p \times n$). Chacune de ses lignes correspond à une source, i.e. à un composant pur. Ce problème de séparation de sources est rencontré en chimie mais aussi en imagerie hyperspectrale (chaque pixel étant un mélange de différents composants purs) utilisée pour l'observation des planètes, des bactéries, etc. Nous sommes face à un problème inverse aveugle, M et X sont inconnus.

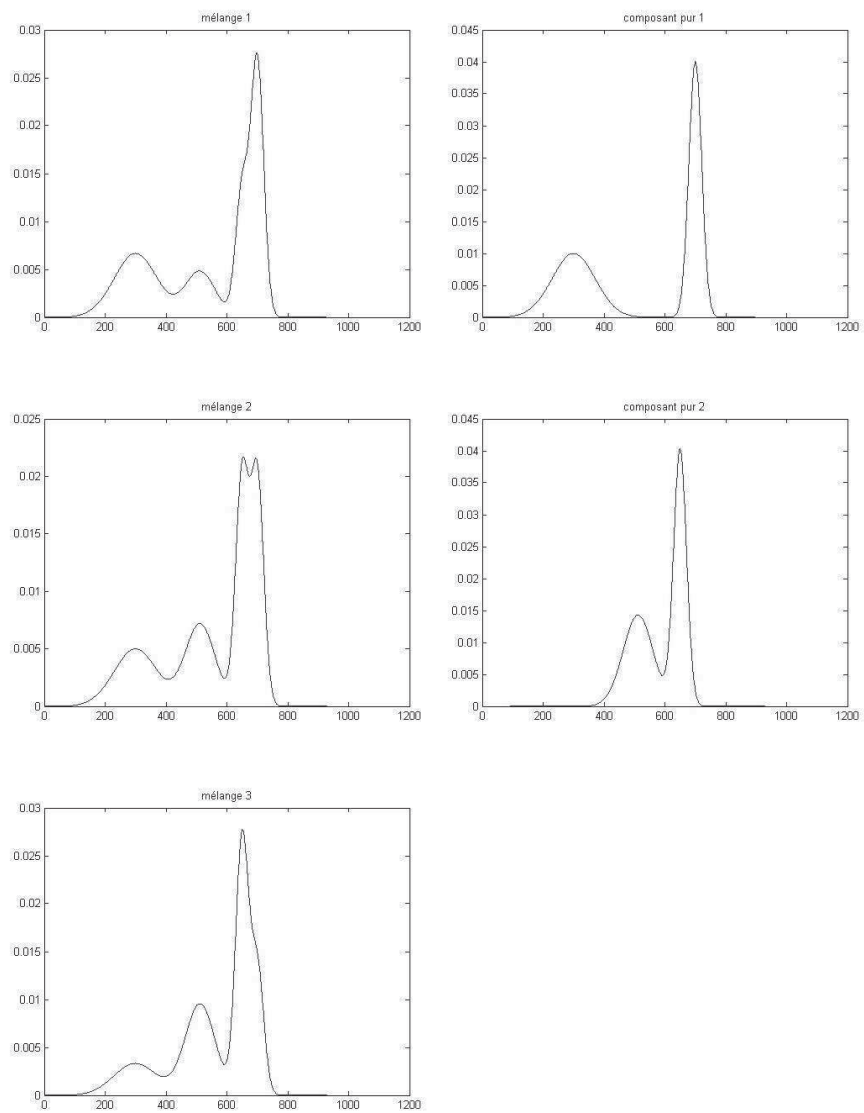


Figure 4. Illustration de trois mélanges de deux composants purs. La colonne de gauche contient les mélanges et la colonne de droite les composants purs.

4. RESOLUTION DES PROBLEMES INVERSES LINEAIRES NON-AVEUGLES

Dans l'introduction, nous avons établi que les problèmes inverses se répartissent en deux groupes. D'une part, il y a les problèmes linéaires et d'autre part les problèmes non-linéaires. Dans ce paragraphe, nous décrivons brièvement les principales méthodes de résolution des problèmes inverses linéaires non-aveugles.

Dans la section 2.1., nous avons vu que, dans le cas des problèmes inverses linéaires, le problème discret s'écrit comme $y = Mx$ où M est une matrice. La question est de trouver x à partir de y . Dans le cas non-aveugle, la matrice M est connue. Nous traitons ici uniquement les problèmes en dimension finie, qui peuvent éventuellement provenir de la discrétisation d'un opérateur intégral comme vu dans la section 2.1.

Si on souhaite résoudre $Mx = y$ et que M est carrée régulière ($\det(M) \neq 0$), la solution unique est simple et vaut $x = M^{-1}y$. Celle-ci peut être calculée par diverses méthodes numériques. Par contre, si on veut résoudre $Mx = y$ avec $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$ et si on suppose le problème mal posé, plusieurs méthodes existent suivant la condition de Hadamard qui n'est pas respectée. Ci-dessous, nous décrivons dans un premier temps les méthodes basées sur la résolution de systèmes par factorisation de matrices, dans un deuxième temps les méthodes de régularisation et terminons en évoquant les méthodes probabilistes.

4.1. Factorisation de matrices

Le système $Mx = y$ avec M non nécessairement carrée régulière peut ne pas admettre de solutions ou bien en avoir une infinité. Le problème inverse est dans ces deux cas mal posé car la première ou la seconde condition au sens de Hadamard n'est pas respectée. Les trois méthodes décrites dans ce paragraphe et basées sur la factorisation de matrices sont applicables lorsque les problèmes, bien que mal posés, vérifient la troisième condition au sens de Hadamard i.e. M est bien conditionnée.

Ci-dessous, nous montrons que ce système peut être résolu par une factorisation de Cholesky ou encore par une factorisation QR. Cette dernière donne une méthode plus coûteuse que la factorisation de Cholesky, mais plus robuste au niveau algorithmique, et constitue la méthode de choix pour résoudre les problèmes de taille raisonnable (quelques centaines). Nous donnons également quelques indications sur la méthode utilisant la factorisation SVD (Singular Value Decomposition).

1. Cholesky

Si on veut résoudre $Mx = y$ avec $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$, si on suppose $m \geq n$, et si

le problème est mal posé au sens de la première ou la seconde condition de Hadamard, le problème est reformulé sous la forme des moindres carrés $\min_x \|Mx - y\|^2$ avec x solution de ce problème si et seulement si $M^T Mx = M^T y$, appelée équation normale.

Supposons M de rang n , la matrice $M^T M$ est définie positive et d'ordre n . Tout d'abord, on constate que l'équation normale représente dans ce cas une compression d'information puisque $n < m$. Ensuite, $M^T M$ étant définie positive, le système $M^T Mx = M^T y$ peut être résolu par la factorisation de Cholesky. Cette méthode bien connue se base sur le théorème suivant : "Si A est une matrice symétrique et définie positive, il existe une unique matrice R triangulaire supérieure, à éléments diagonaux strictement positifs, telle que $A = R^T R$ ". Dans notre cas, nous appliquons la factorisation de Cholesky à $M^T M$: $M^T M = R^T R$ avec R triangulaire supérieure. Il suffit alors de résoudre $R^T z = M^T y$ et puis $Rx = z$ pour obtenir la solution. Les deux systèmes sont triangulaires, leur résolution est donc immédiate.

En dépit de sa simplicité, et de son coût raisonnable, la méthode des équations normales n'est pas recommandée pour des raisons de stabilité. Elle cumule deux inconvénients :

- (a) Le simple fait de former la matrice $M^T M$ peut faire perdre de l'information sur les petits coefficients de la matrice M , ce qui peut avoir des conséquences désastreuses.
- (b) Le conditionnement de la matrice $M^T M$ est le carré de celui de M .

2. QR

La méthode moderne pour résoudre $Mx = y$ est basée sur la factorisation QR de la matrice M de dimension $m \times n$ avec $m \geq n$, où Q est une matrice orthogonale d'ordre m , et R est triangulaire supérieure d'ordre n . Pour résoudre $Mx = y$, nous décomposons M en $Q(R; 0)$. Nous résolvons $Rx = z_1$ avec $Q^T y = (z_1; z_2)$. Cette méthode, bien que plus coûteuse que la précédente, est plus robuste au niveau algorithmique, et constitue la méthode de choix pour résoudre les problèmes inverses linéaires non aveugles de taille raisonnable (quelques centaines) avec un bon conditionnement.

3. SVD

Cette méthode est plus générale que les deux précédentes car elle n'impose aucune condition de dimension ou de rang. Après avoir réalisé une décomposition SVD de la matrice M de dimension $m \times n$ et de rang r : $M = U\Sigma V^T$ avec U et V matrices orthogonales de dimension $m \times m$ et $n \times n$ respectivement et Σ matrice de dimension $m \times n$ nulle excepté les r premiers éléments diagonaux strictement positifs ($\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \sigma_r > 0$), nous avons :

$$\|Mx - y\|_2^2 = \|U\Sigma V^T x - y\|_2^2 = \|\Sigma V^T x - U^T y\|_2^2$$

puisque U est orthogonale. Notons $w = U^T y$ et $z = V^T x$, nous avons donc

$$\|Mx - y\|_2^2 = \|\Sigma z - w\|_2^2 = \sum_{i=1}^r (\sigma_i z_i - w_i)^2.$$

Cette somme de carrés est minimale pour

$$z_i = \begin{cases} w_i/\sigma_i & \text{pour } 1 \leq i \leq r \\ \text{quelconque} & \text{pour } i \geq r + 1. \end{cases} \quad (1)$$

Nous trouvons les solutions à partir de z en faisant $x = Vz$. Dans le cas où M est de rang plein, il y a une solution unique. Sinon, il y a une infinité de solutions. Celle de norme minimale est celle avec $z_i = 0$ pour $i \geq r + 1$. La méthode SVD donne une méthode numérique ayant d'excellentes propriétés de stabilité au niveau de l'algorithme. Le seul inconvénient en est son coût, plus élevé que la méthode basée sur la factorisation QR ([KERN, 2002]).

Ces trois méthodes permettent de résoudre des problèmes mal posés au sens où une des deux premières conditions de Hadamard n'est pas satisfaite. Lorsque c'est la troisième condition de Hadamard qui n'est pas remplie, ces méthodes ne sont pas satisfaisantes. Illustrons ces propos avec la factorisation SVD pour M de rang n . On peut montrer que l'erreur sur la solution x est bornée supérieurement par l'inverse de la plus petite valeur singulière multipliée par l'erreur sur la donnée y . Dans le cas où cette plus petite valeur singulière est petite, l'amplification peut devenir dramatique. Ainsi, dans le cas où la troisième condition de Hadamard n'est pas satisfaite, on se tourne vers d'autres méthodes, celles dites de régularisation.

4.2. Régularisation

Régulariser un problème mal posé, c'est le remplacer par un autre, bien posé, de sorte que l' "erreur commise" soit compensée par le gain de stabilité. Dans ce paragraphe, nous présentons une introduction aux méthodes de régularisation les plus courantes, à savoir la méthode de Tikhonov et la troncature spectrale ainsi qu'une méthode itérative, la méthode de Landweber.

1. La méthode de Tikhonov

Pour résoudre l'instabilité d'un problème $Mx = y$ mal posé au sens de la troisième condition de Hadamard, nous introduisons une information a priori : un estimé a priori x_0 . Pour un nombre $\epsilon > 0$ (le coefficient de régularisation), nous remplaçons le problème de départ $Mx = y$ par le problème régularisé :

$$\min_x \frac{1}{2} \|Mx - y\|^2 + \frac{\epsilon^2}{2} \|x - x_0\|^2.$$

On peut montrer que ce problème admet une solution unique, qui dépend continûment de y , et qui converge lorsque $\epsilon \rightarrow 0$ vers la solution de $Mx = y$ la plus proche de x_0 . Ce problème est donc bien posé. Évidemment, si ϵ est choisi trop petit, le problème de départ et le problème régularisé seront proches, donc tous les deux mal posés si celui de départ l'est, alors que si ϵ est trop grand, le problème régularisé ne sert qu'à forcer x à être proche de x_0 . Le choix optimal du paramètre de régularisation ϵ est par conséquent délicat.

Nous voyons donc bien la nécessité d'adapter le paramètre de régularisation au niveau de bruit présent dans les données. Une telle stratégie de régularisation peut se concevoir de deux façons :

- Si l'on possède une estimation du niveau de bruit, on peut en déduire comment il faut choisir ϵ pour obtenir la convergence. Une telle stratégie s'appelle une stratégie de régularisation a priori. Elle suppose que l'on sache estimer le bruit présent dans les données, ce qui n'est pas forcément possible ;
- L'autre stratégie, appelée a posteriori, consiste à estimer au cours du calcul la valeur convenable du paramètre, en utilisant uniquement les données disponibles.

Des informations complémentaires se trouvent dans [PETIT, 2013].

Cette notion de régularisation a été étendue. On peut également régulariser le problème par une (des) contrainte(s) $F(x) = 0$ comme suit :

$$\min_x \frac{1}{2} \|Mx - y\|^2 + \frac{\epsilon^2}{2} \|F(x)\|^2.$$

Nous verrons plus loin que le principe de régularisation étendu est largement utilisé dans les problèmes inverses aveugles. Son avantage est l'utilisation d'information a priori.

2. La troncature spectrale

Il s'agit d'utiliser la factorisation SVD développée à la section 4.1.1. et de mettre $z_i = 0$ dans l'équation (1) non seulement pour $i \geq r + 1$ mais pour tous les $i \geq s$ avec s à choisir inférieur ou égal à r . Le choix du s joue le paramètre de régularisation, et, comme pour la méthode de Tikhonov, le choix du paramètre de régularisation est à la fois important et délicat. Si s est choisi trop grand, l'influence des petites valeurs singulières conduit à l'instabilité. Si s est trop petit, la solution obtenue sera éloignée de la vraie solution. Dans cette discussion, il faut bien entendu prendre en compte la rapidité plus ou moins grande avec laquelle les valeurs singulières tendent vers 0. Plus cette décroissance est rapide, plus s devra être choisi petit.

3. Méthodes itératives

Les deux méthodes de régularisation (régularisation de Tikhonov, troncature spectrale) vues précédemment sont qualifiées de "directes" parce qu'elles donnent (dans le cas de la dimension finie) la solution exacte du problème régularisé (aux erreurs d'arrondis près) en un nombre fini d'opérations. Pour des problèmes de taille modérée, ces méthodes sont les plus utilisées.

Toutefois, pour des problèmes de grande taille où les matrices obtenues après discrétisation sont souvent creuses, ces méthodes s'avèrent inadapées car d'une part le nombre d'opérations devient trop grand, et d'autre part, ces méthodes ne respectent pas la structure des matrices. Une alternative est alors de se tourner vers des méthodes itératives, qui construisent une suite de solutions approchées qui (dans le cas non bruité) convergent vers la solution désirée. Dans le contexte des problèmes inverses bruités, la situation est plus compliquée : en présence de bruit, la suite construite par la méthode itérative ne converge pas, en général, vers une solution du problème de départ. Il est, encore une fois, nécessaire de régulariser le processus itératif, et c'est l'indice d'itération lui-même qui joue le rôle de paramètre de régularisation. En d'autres termes, il convient d'arrêter les itérations plus tôt qu'on ne le ferait dans un cas non bruité [KERN, 2002].

Étant donné un paramètre de relaxation w , la méthode de Landweber pour résoudre le problème de moindres carrés $M^T Mx = M^T y$ est définie par la formule de récurrence

$$x_{n+1} = x_n + w(M^T y - M^T Mx_n).$$

Malheureusement, elle converge trop lentement pour être utilisable en pratique. D'autres méthodes plus performantes existent. Les deux plus importantes sont la méthode de Brakhage et la méthode du gradient conjugué (et ses variantes). Cette dernière méthode est celle qui est le plus communément employée [KIRSCH, 1996].

4.3. Méthodes probabilistes

L'inversion stochastique a été développée par Tarantola et Menke. Le principe est de considérer toutes les variables comme aléatoires afin de représenter toutes les incertitudes. La solution du problème inverse est la fonction de densité de probabilité associée à l'inconnue x et la mesure y , à partir de laquelle on peut chercher des grandeurs caractéristiques : valeur moyenne, valeur de plus grande probabilité, dispersion, corrélations. Les principes de ces méthodes sont détaillés dans [BONNET, 2008].

5. RESOLUTION DES PROBLEMES INVERSES LINEAIRES AVEUGLES

Les méthodes dont il est question jusqu'à présent concernent les problèmes inverses linéaires *non aveugles* i.e. M est connue. Or, souvent, la fonction instrumentale M est inconnue ou seulement partiellement connue. On parle alors de problème inverse *aveugle* ou *myope*. La fonction à minimiser $\|Mx - y\|^2$, bien que convexe pour x et M séparément, n'est pas convexe de manière conjointe et entraîne donc l'existence possible de plusieurs minima locaux. La stratégie habituellement utilisée est alors la minimisation alternée sur x (M fixé) et sur M (x fixé).

En réalité, dans la littérature, le problème est souvent traité de manière plus générale avec X et Y des matrices au lieu de x et y vecteurs i.e. résoudre $MX = Y$ au lieu de $Mx = y$. Les méthodes existantes utilisent souvent une minimisation alternée pour minimiser les moindres carrés régularisés [AYERS ET AL., 1988] ou Richardson-Lucy [FISH ET AL., 1995]. Des approches bayésiennes existent aussi.

Les problèmes inverses aveugles étant difficiles, il est donc conseillé d'utiliser de l'information a priori au maximum. En particulier, intégrer des contraintes de positivité s'est avéré très puissant. Le cas particulier où les matrices X et M ne contiennent que des éléments positifs s'appelle "Non-negative matrix factorization" (NMF) et suscite actuellement beaucoup de recherches ([LECHARLIER ET AL., 2013]). Celles-ci ont entre autres débuté avec les algorithmes multiplicatifs de Lee and Seung [SEUNG ET AL., 1999].

6. RESOLUTION DES PROBLEMES INVERSES NON-LINEAIRES

Dans le cas non-linéaire, le problème à résoudre est $y = M(x, \theta) + b$. Il se transforme en un problème d'optimisation : $\min_x J(x) = \frac{1}{2} \|M(x, \theta) - y\|^2$.

La difficulté réside à différents niveaux ([KERN, 2002]) :

- la fonction à minimiser est en général non convexe. Cela conduit à l'existence de minima locaux, et la méthode d'optimisation choisie peut converger vers n'importe lequel de ces minima.
- Le problème inverse peut-être sous-déterminé, du fait d'un manque de données (qui est intrinsèque au problème). Cela conduit à l'existence de plusieurs solutions, autrement dit de plusieurs paramètres produisant les mêmes observations.
- Le manque de continuité produit une instabilité. Même si l'on peut (en théorie) résoudre le problème pour des observations exactes, cela ne veut pas dire que l'on pourra le résoudre pour des données bruitées, même si le niveau de bruit est faible.

– Une difficulté de nature différente est liée au coût de la résolution. En effet, la simple évaluation de la fonction coût peut s’avérer fastidieuse. Dans ce cas, un recours à différentes méthodes d’optimisation sophistiquées en fonction du modèle M est nécessaire.

7. EN GUISE DE CONCLUSION

Les problèmes inverses se retrouvent dans de très nombreuses disciplines et consistent à déterminer des causes à partir de la connaissance des effets. Cependant, ce sont des problèmes difficiles à résoudre car très souvent mal posés au sens de Hadamard. Les outils majoritairement employés sont empruntés à l’optimisation. Cette note ne constitue qu’une très brève introduction aux problèmes inverses. Des compléments d’information se trouvent dans [TARANTOLA, 2005], [PARKER, 1994], [ASTER ET AL., 2012].

Références

- [ASTER ET AL., 2012] ASTER R.C., BORCHERS B., THURBER C. [2012]. *Parameter estimation and inverse problems*. Academic Press.
- [AYERS ET AL., 1988] AYERS G.R. DAINTY J.C. [1988]. *Iterative blind deconvolution method and its applications*. Optics Letters, Vol. 13, Issue 7, pp. 547-549.
- [BONNET, 2008] BONNET M. [2008]. *Problèmes inverses*. Syllabus du cours à l’Ecole Centrale de Paris.
- [CAVALIER, 2003] CAVALIER L. [2003]. *Problèmes inverses en statistique*. Mémoire présenté pour obtenir l’habilitation à diriger des recherches.
- [FISH ET AL., 1995] FISH D.A., BRINCOMBE A.M., PIKE E.R., WALKER J.G.. [1995]. *Blind deconvolution by means of the Richardson-Lucy algorithm*. J. Opt. Soc. Am. A 12, 58-65.
- [HAZART ET AL., 2005] HAZART A., GIOVANNELLI J.-F., DUBOIS S., CHATELLIER L. [2005]. *Pollution de milieux poreux : identifiabilité et identification de modèles paramétriques de sources*. 20ème Colloque sur le traitement du signal et des images, 2005 :144-147.
- [KERN, 2002] KERN M. [2002]. *Problèmes inverses*. Syllabus du cours à l’Ecole supérieure d’ingénieurs Léonard de Vinci.
- [KIRSCH, 1996] KIRSCH A. [1996]. *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*. Number 120 in Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New-York.
- [LECHARLIER ET AL., 2013] LECHARLIER L., DE MOL C. [2013]. *Regularized blind deconvolution with Poisson data*. Journal of Physics : Conference Series 464.

- [SEUNG ET AL., 1999] SEUNG H.S., LEE D.D. [1999]. *Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization*. Nature, 401(6755) :788-791.
- [MONTEILLER, 2011] MONTEILLER V. [2011]. *Tomographie à l'aide de décalages temporels d'ondes sismiques P : développements méthodologiques et applications*. Thèse de doctorat. Université de Savoie.
- [PARKER, 1994] PARKER R.L. [1994]. *Geophysical inverse theory*. Princeton University Press.
- [PETIT, 2013] PETIT D. [2013]. *Techniques inverses et estimation de paramètres*. Ed. Techniques de l'ingénieur Mécanique physique.
- [ROUSSEL, 2011] ROUSSEL G. [2011]. *Problèmes inverses*. Stic et Environnement.
- [TARANTOLA, 2005] TARANTOLA A. [2005]. *Inverse problem theory*. SIAM.

La collection

NOTES DE STATISTIQUE ET D'INFORMATIQUE

réunit divers travaux (documents didactiques, notes techniques, rapports de recherche, publications, etc.) émanant de l'Unité de Statistique, Informatique et Mathématique appliquées à la bioingénierie de l'Université de Liège – Gembloux Agro-Bio Tech et de l'Unité Systèmes agraires, Territoire et Technologies de l'Information du Centre wallon de Recherches agronomiques (Gembloux - Belgique).

La liste des notes disponibles peut être obtenue sur simple demande à l'adresse ci-dessous :

*Université de Liège – Gembloux Agro-Bio Tech
Unité de Statistique, Informatique et Mathématique appliquées à la bioingénierie
Avenue de la Faculté d'Agronomie, 8
B-5030 GEMBLoux (Belgique)
E-mail : sima.gembloux@ulg.ac.be*

Plusieurs notes sont directement accessibles à l'adresse Web suivante, section Publications :

<http://www.gembloux.ulg.ac.be/si/>

En relation avec certaines notes, des programmes spécifiques sont également disponibles à la même adresse, section Macros.

Quelques titres récents sont cités ci-après :

- CHARLES C. [2011]. Introduction aux applications des ondelettes. *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2011/2, 35 p.
- PALM R., BROSTAUX Y. et CLAUSTRIAUX J. J. [2011]. Macros Minitab pour le choix d'une transformation pour la normalisation de variables. *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2011/3, 15 p.
- PALM R., BROSTAUX Y. [2011]. La régression logistique avec Minitab. *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2011/4, 15 p.
- PALM R., BROSTAUX Y., CLAUSTRIAUX J. J. [2011]. Inférence statistique et critères de qualité de l'ajustement en régression logistique binaire. *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2011/5, 32 p.
- CLAUSTRIAUX J. J., PALM R., FERRANDIS-VALLTERRA S., BROSTAUX Y. et PLANCHON V. [2012]. Tables de contingence à trois dimensions : aspects théoriques, applications et analogie avec l'analyse de la variance à trois critères de classification. *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2012/1, 19 p.
- PALM R., CHARLES C., CLAUSTRIAUX J. J. [2012]. La représentation d'une matrice par biplot. *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2012/2, 22 p.
- CLAUSTRIAUX J. J. [2012]. La collecte de l'information. Pour qui ? Pourquoi ? Comment ? *Notes Stat. Inform.* (Gembloux) 2012/3, 7 p.