ED Analyse discriminante

Exercice 1

Considérons que les directions discriminantes sont déterminées grâce au critère $\arg\max_{\mathbf{u}} \left[\left({}^T\mathbf{u}\ \mathbf{E}\ \mathbf{u} \right) / \left({}^T\mathbf{u}\ \mathbf{D}\ \mathbf{u} \right) \right]$, qui mène au problème de valeurs propres généralisé $\mathbf{E}\ \mathbf{u} = \mu\ \mathbf{D}\ \mathbf{u}$.

i) Quel est le rapport entre les vecteurs propres de ce problème et les vecteurs propres du problème $\mathbf{E}\ \mathbf{u} = \lambda\ \mathbf{S}\ \mathbf{u}$? Et entre les valeurs propres de ces deux problèmes ?

ii) Quel est le rapport entre le rang de $\mathbf{S}$ et les rangs de $\mathbf{D}$ et de $\mathbf{E}$?

iii) Laquelle des matrices $\mathbf{S}$ et $\mathbf{D}$ est la mieux conditionnée ?

iv) Quelles conclusions pouvons-nous tirer de ces observations ?

Exercice 2

Considérons un ensemble d'individus divisé en deux classes, A et B, l'effectif de A étant 2 fois inférieur à l'effectif de B. Chacun des individus est décrit par deux variables numériques. Les centres de gravité des classes sont $\mathbf{g}_A = {}^T\begin{bmatrix} 0 & -1 \end{bmatrix}$, $\mathbf{g}_B = {}^T\begin{bmatrix} 0 & 2 \end{bmatrix}$ et les matrices de covariance intra-classe sont

$$\mathbf{S}_A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix},\ \mathbf{S}_B = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

i) Déterminez la matrice de covariance totale.

ii) Déterminez l'équation de la frontière de discrimination entre les classes suivant l'approche de Sebestyen.

iii) Pourquoi la frontière obtenue a-t-elle cette *forme* ?

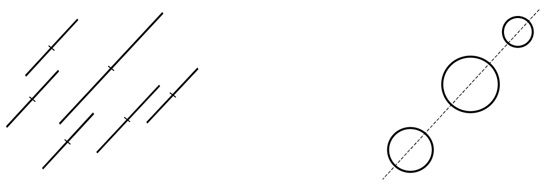
iv) Pourquoi la frontière a-t-elle cette *orientation* ?

Solution exercice 1

i) Grâce à la relation de Huygens de décomposition de la variance, $\mathbf{S} = \mathbf{E} + \mathbf{D}$, de l'équation $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \lambda\,\mathbf{S}\,\mathbf{u}$ on obtient $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \lambda\,(\mathbf{E} + \mathbf{D})\,\mathbf{u}$, ou encore $(1-\lambda)\,\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \lambda\,\mathbf{D}\,\mathbf{u}$. Comme $\lambda < 1$, en comparant avec $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \mu\,\mathbf{D}\,\mathbf{u}$ on constate que les valeurs propres sont liées par la relation $\mu = \lambda / (1-\lambda)$ (ou $\lambda = \mu / (1+\mu)$) et que le vecteur propre unitaire de $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \lambda\,\mathbf{S}\,\mathbf{u}$ associé à λ est aussi vecteur propre unitaire de $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \mu\,\mathbf{D}\,\mathbf{u}$, associé à $\mu = \lambda / (1-\lambda)$.

ii) En tant que matrices de covariance, les matrices $\mathbf{S}$, $\mathbf{D}$ et $\mathbf{E}$ sont semi-définies positives, ce qui implique que pour tout vecteur $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^p$, ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{S}\,\mathbf{v} \geq 0$, ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{D}\,\mathbf{v} \geq 0$ et ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{E}\,\mathbf{v} \geq 0$. Également, pour toute matrice semi-définie positive $\mathbf{A}$, de dimensions $p \times p$, ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{A}\,\mathbf{v} = 0$ si et seulement si le vecteur $\mathbf{v}$ appartient à l'espace nul de $\mathbf{A}$, c'est à dire $\mathbf{A}\,\mathbf{v} = \mathbf{0}_p$ (où $\mathbf{0}_p$ est le vecteur nul de dimension p). Il est évident que si $\mathbf{A}\,\mathbf{v} = \mathbf{0}_p$ alors ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{A}\,\mathbf{v} = 0$. Pour montrer l'implication inverse, on rappellera que toute matrice symétrique semi-définie positive $\mathbf{A}$, de dimensions $p \times p$, peut être mise sous la forme $\mathbf{A} = {}^T\mathbf{U}\,\mathbf{D}\,\mathbf{U}$, où $\mathbf{U}$ est une matrice orthogonale de rang p et $\mathbf{D}$ une matrice diagonale, de même rang que $\mathbf{A}$, dont les éléments de la diagonale principale sont les valeurs propres de $\mathbf{A}$. Si ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{A}\,\mathbf{v} = 0$ alors ${}^T(\mathbf{U}\,\mathbf{v})\mathbf{D}(\mathbf{U}\,\mathbf{v}) = 0$, ou encore $\sum_{i=1}^{p} (\mathbf{U}\,\mathbf{v})_i^2\,\lambda_i = 0$, où $(\mathbf{U}\,\mathbf{v})_i$ est la composante i du vecteur $\mathbf{U}\,\mathbf{v}$ et λ_i est la i-ème valeur propre de $\mathbf{A}$. La matrice $\mathbf{A}$ étant symétrique semi-définie positive, toutes ses valeurs propres sont supérieures ou égales à 0. La dernière équation montre que si $\lambda_i > 0$ alors la composante $(\mathbf{U}\,\mathbf{v})_i$ doit être nulle et donc $\mathbf{D}\,\mathbf{U}\,\mathbf{v} = \mathbf{0}_p$. Par conséquent, $\mathbf{A}\,\mathbf{v} = {}^T\mathbf{U}\,\mathbf{D}\,\mathbf{U}\,\mathbf{v} = \mathbf{0}_p$, la preuve de l'équivalence entre $\mathbf{A}\,\mathbf{v} = \mathbf{0}_p$ et ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{A}\,\mathbf{v} = 0$ est donc terminée.

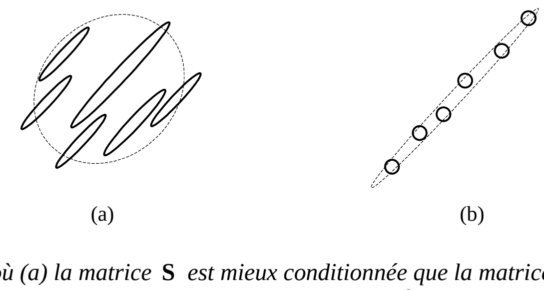
La relation de Huygens implique l'égalité suivante : ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{S}\,\mathbf{v} = {}^T\mathbf{v}\,\mathbf{E}\,\mathbf{v} + {}^T\mathbf{v}\,\mathbf{D}\,\mathbf{v}$. En conséquence, ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{S}\,\mathbf{v} = 0$ si et seulement si ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{E}\,\mathbf{v} + {}^T\mathbf{v}\,\mathbf{D}\,\mathbf{v} = 0$, or les inégalités mentionnées plus haut montrent que ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{E}\,\mathbf{v} + {}^T\mathbf{v}\,\mathbf{D}\,\mathbf{v} = 0$ si et seulement si ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{D}\,\mathbf{v} = 0$ et ${}^T\mathbf{v}\,\mathbf{E}\,\mathbf{v} = 0$. L'espace nul de $\mathbf{S}$ est donc l'intersection entre les espaces nuls de $\mathbf{D}$ et de $\mathbf{E}$, ce qui prouve que $\mathrm{rang}(\mathbf{S}) \geq \mathrm{rang}(\mathbf{D})$ et $\mathrm{rang}(\mathbf{S}) \geq \mathrm{rang}(\mathbf{E})$. La figure 1 illustre deux cas simples où les inégalités entre les rangs sont strictes.



(a) (b)

Figure 1. *Illustration en 2D de cas où (a)* $\mathrm{rang}(\mathbf{S}) > \mathrm{rang}(\mathbf{D})$ *(les classes, représentées par les traits, sont unidimensionnelles) et (b)* $\mathrm{rang}(\mathbf{S}) > \mathrm{rang}(\mathbf{E})$ *(les classes, représentées par les cercles, sont bidimensionnelles, mais leurs centres de gravité se situent tous sur une même droite, représentée en pointillés)*

iii) Les cas illustrés figure 2 indiquent que chacune des matrices $\mathbf{S}$ et $\mathbf{D}$ peut être mieux conditionnée que l'autre.



(a) (b)

Figure 2. *Illustration en 2D de cas où (a) la matrice* $\mathbf{S}$ *est mieux conditionnée que la matrice* $\mathbf{D}$ *(les classes sont représentées par les ellipses en trait continu, la forme globale du nuage par l'ellipse en pointillés) et (b) la matrice* $\mathbf{D}$ *est mieux conditionnée que la matrice* $\mathbf{S}$ *(les classes sont représentées par les cercles, la forme globale du nuage par l'ellipse en pointillés)*

iv) Le point (ii) montre que dans certains cas où $\operatorname{rang}(\mathbf{S}) > \operatorname{rang}(\mathbf{D})$, la résolution du problème $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \lambda\,\mathbf{S}\,\mathbf{u}$ est préférable à la résolution du problème $\mathbf{E}\,\mathbf{u} = \mu\,\mathbf{D}\,\mathbf{u}$. En effet, pour ce dernier problème des directions à fort pouvoir discriminant dans l'espace initial peuvent correspondre à des valeurs propres nulles et seront donc ignorées (cas illustré par la figure 1 (a)). Le point (iii) indique en revanche que si les rangs des matrices $\mathbf{S}$ et $\mathbf{D}$ sont les mêmes, il n'y a pas de relation générale entre le conditionnement de l'une et le conditionnement de l'autre. Il est donc utile d'examiner le conditionnement des deux matrices $\mathbf{S}$ et $\mathbf{D}$ afin de résoudre le problème de valeurs et vecteurs propres le mieux conditionné.

Solution exercice 2

i) Pour un élément de la matrice de covariance totale nous pouvons écrire $s(j,l) = d(j,l) + e(j,l)$, ou encore

$$s(j,l) = \frac{1}{n}\left[n_A\, s_A(j,l) + n_B\, s_B(j,l)\right] + \frac{1}{n}\left[n_A\left(g_{Aj} - g_j\right)\left(g_{Al} - g_l\right) + n_B\left(g_{Bj} - g_j\right)\left(g_{Bl} - g_l\right)\right]$$

Les effectifs des deux classes étant $2\,n_A = n_B = (2/3)n$ (n est l'effectif total), le centre de gravité du nuage est $\mathbf{g} = {}^{T}[0 \quad 1]$ et $s(j,l) = \frac{1}{3}\left[s_A(j,l) + 2\,s_B(j,l)\right] + \frac{1}{3}\left[\left(g_{Aj} - g_j\right)\left(g_{Al} - g_l\right) + 2\left(g_{Bj} - g_j\right)\left(g_{Bl} - g_l\right)\right]$, par conséquent $\mathbf{S} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 14 \end{bmatrix}$

ii) La frontière de discrimination entre les classes, déterminée suivant l'approche de Sebestyen, correspond à l'équation $\left[\det \mathbf{S}_A\right]^{1/2}\ {}^{T}(\mathbf{x} - \mathbf{g}_A)\,\mathbf{S}_A^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{g}_A) = \left[\det \mathbf{S}_B\right]^{1/2}\ {}^{T}(\mathbf{x} - \mathbf{g}_B)\,\mathbf{S}_B^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{g}_B)$, où $\mathbf{x} = {}^{T}[x_1 \quad x_2]$. Nous obtenons $6x_2 - 3 = 0$, l'équation d'une droite (voir la figure 3). Le point d'intersection avec l'axe x_2 est $x_1 = 0$, $x_2 = 0{,}5$.

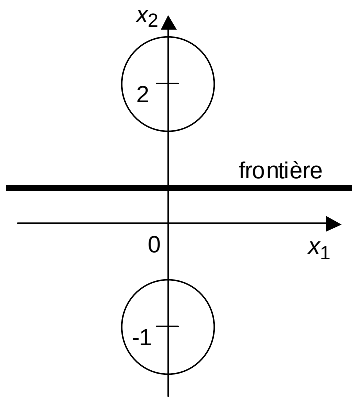


Figure 3. *Frontière de séparation et forme des classes*

iii) La frontière est une droite car $\left[\det \mathbf{S}_A\right]^{1/2}\ \mathbf{S}_A^{-1} = \left[\det \mathbf{S}_B\right]^{1/2}\ \mathbf{S}_B^{-1}$, ce qui montre que la métrique employée par rapport à chaque classe est ici la même.

iv) La frontière est parallèle à l'axe x_1 car les centres de gravité sont situés sur une droite orthogonale à l'axe x_1 *et* les covariances sont nulles pour chacune des 2 classes (seules les variances sont différentes de 0).