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 $\mathbf{g}_A = {}^T\begin{bmatrix} 0 & -1 \end{bmatrix}$, $\mathbf{g}_B = {}^T\begin{bmatrix} 0 & 2 \end{bmatrix}$ (^{T} indique la transposition du vecteur ou de la matrice qu'il précède) 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

L'objectif de cet exercice est de clarifier le lien entre les problèmes $\mathbf{E\,u} = \mu\,\mathbf{D\,u}$ et $\mathbf{E\,u} = \lambda\,\mathbf{S\,u}$, car certains logiciels choisissent de résoudre le premier alors que d'autres logiciels choisissent le second. Il n'est pas indispensable de suivre les éléments de preuve ci-dessous, il est en revanche très utile d'examiner attentivement les exemples donnés dans les figures 1 et 2.

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

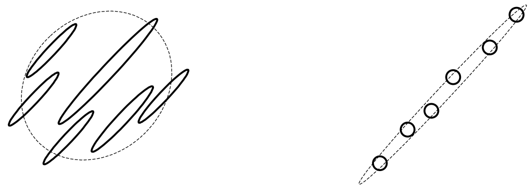
ii) En tant que matrices de covariance, les matrices $\mathbf{S}$, $\mathbf{D}$ et $\mathbf{E}$ sont semi-définies positives, ce qui implique que pour tout vecteur $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^p$, ${}^T\mathbf{v\,S\,v} \geq 0$, ${}^T\mathbf{v\,D\,v} \geq 0$ et ${}^T\mathbf{v\,E\,v} \geq 0$. Également, pour toute matrice semi-définie positive $\mathbf{A}$, de dimensions $p \times p$, ${}^T\mathbf{v\,A\,v} = 0$ si et seulement si le vecteur $\mathbf{v}$ appartient à l'espace nul de $\mathbf{A}$, c'est à dire $\mathbf{A\,v} = \mathbf{0}_p$ (où $\mathbf{0}_p$ est le vecteur nul de dimension p). Il est évident que si $\mathbf{A\,v} = \mathbf{0}_p$ alors ${}^T\mathbf{v\,A\,v} = 0$. 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 $\mathbf{A} = {}^T\mathbf{U\,D\,U}$, 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 ${}^T\mathbf{v\,A\,v} = 0$ alors ${}^T(\mathbf{U\,v})\mathbf{D}(\mathbf{U\,v}) = 0$, ou encore $\sum_{i=1}^{p} (\mathbf{U\,v})_i^2\,\lambda_i = 0$, où $(\mathbf{U\,v})_i$ est la composante i du vecteur $\mathbf{U\,v}$ 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 $(\mathbf{U\,v})_i$ doit être nulle et donc $\mathbf{D\,U\,v} = \mathbf{0}_p$. Par conséquent, $\mathbf{A\,v} = {}^T\mathbf{U\,D\,U\,v} = \mathbf{0}_p$, la preuve de l'équivalence entre $\mathbf{A\,v} = \mathbf{0}_p$ et ${}^T\mathbf{v\,A\,v} = 0$ est donc terminée.

La relation de Huygens implique l'égalité suivante : ${}^T\mathbf{v\,S\,v} = {}^T\mathbf{v\,E\,v} + {}^T\mathbf{v\,D\,v}$. En conséquence, ${}^T\mathbf{v\,S\,v} = 0$ si et seulement si ${}^T\mathbf{v\,E\,v} + {}^T\mathbf{v\,D\,v} = 0$, or les inégalités mentionnées plus haut montrent que ${}^T\mathbf{v\,E\,v} + {}^T\mathbf{v\,D\,v} = 0$ si et seulement si ${}^T\mathbf{v\,D\,v} = 0$ et ${}^T\mathbf{v\,E\,v} = 0$. 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 (relation de Huygens, voir le cours) $s(j,l) = d(j,l) + e(j,l)$, pour $j,l \in \{1, 2\}$, ou encore, en explicitant $d(j,l)$ et $e(j,l)$ (voir les définitions dans le cours) :

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

où $s_A(j,l)$ est l'élément d'indices j,l de la matrice $\mathbf{S}_A$, g_j est la composante j du centre de gravité $\mathbf{g}$ du nuage global, etc.

Les effectifs des deux classes sont $2\,n_A = n_B = (2/3)n$ (n est l'effectif total).

Le centre de gravité du nuage global est $\mathbf{g} = \dfrac{n_A}{n}\mathbf{g}_A + \dfrac{n_B}{n}\mathbf{g}_B$, donc $\mathbf{g} = \dfrac{1}{3}\begin{bmatrix}0\\-1\end{bmatrix} + \dfrac{2}{3}\begin{bmatrix}0\\2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$.

A partir des relations entre effectifs, on peut réécrire l'expression pour un élément de $\mathbf{S}$:

$$s(j,l) = \frac{1}{3}\left[s_A(j,l) + 2 s_B(j,l)\right] + \frac{1}{3}\left[\left(g_{Aj} - g_j\right)\left(g_{Al} - g_l\right) + 2\left(g_{Bj} - g_j\right)\left(g_{Bl} - g_l\right)\right]$$

On obtient

$$s(1,1) = \frac{1}{3}\left[2 + 2\cdot 3\right] + \frac{1}{3}\left[(0-0)(0-0) + 2(0-0)(0-0)\right] = 8$$

$$s(1,2) = \frac{1}{3}\left[0 + 2\cdot 0\right] + \frac{1}{3}\left[(0-0)(-1-1) + 2(0-0)(2-1)\right] = 0$$

$$s(2,1) = \frac{1}{3}\left[0 + 2\cdot 0\right] + \frac{1}{3}\left[(-1-1)(0-0) + 2(2-1)(0-0)\right] = 0$$

$$s(2,2) = \frac{1}{3}\left[2 + 2\cdot 3\right] + \frac{1}{3}\left[(-1-1)(-1-1) + 2(2-1)(2-1)\right] = 14$$

Par conséquent, $\mathbf{S} = \dfrac{1}{3}\begin{bmatrix}8 & 0\\0 & 14\end{bmatrix}$

ii) La frontière de discrimination entre les classes, déterminée suivant l'approche de Sebestyen, correspond à l'équation suivante (voir le cours)

$$\left[\det \mathbf{S}_A\right]^{1/2}\ {}^{T}\!\left(\mathbf{x} - \mathbf{g}_A\right)\mathbf{S}_A^{-1}\left(\mathbf{x} - \mathbf{g}_A\right) = \left[\det \mathbf{S}_B\right]^{1/2}\ {}^{T}\!\left(\mathbf{x} - \mathbf{g}_B\right)\mathbf{S}_B^{-1}\left(\mathbf{x} - \mathbf{g}_B\right)$$

où $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ est un point générique situé sur la frontière (c'est-à-dire à égale distance de chacune des classes).

Nous avons

$$\det \mathbf{S}_A = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 2 \cdot 2 - 0 \cdot 0 = 4. \quad \mathbf{S}_A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\mathbf{S}_A \cdot \mathbf{S}_A^{-1} = \mathbf{S}_A^{-1} \cdot \mathbf{S}_A = \mathbf{I}_2).$$

$$\det \mathbf{S}_B = \begin{vmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{vmatrix} = 3 \cdot 3 - 0 \cdot 0 = 9. \quad \mathbf{S}_B^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\mathbf{S}_B \cdot \mathbf{S}_B^{-1} = \mathbf{S}_B^{-1} \cdot \mathbf{S}_B = \mathbf{I}_2).$$

L'équation de la frontière devient

$$2 \cdot {}^T(\mathbf{x} - \mathbf{g}_A) \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{g}_A) = 3 \cdot {}^T(\mathbf{x} - \mathbf{g}_B) \cdot \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{g}_B)$$

ou encore

$$2 \cdot {}^T\begin{bmatrix} x_1 - 0 \\ x_2 - (-1) \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - 0 \\ x_2 - (-1) \end{bmatrix} = 3 \cdot {}^T\begin{bmatrix} x_1 - 0 \\ x_2 - 2 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - 0 \\ x_2 - 2 \end{bmatrix}$$

Nous obtenons $x_1^2 + (x_2 + 1)^2 = x_1^2 + (x_2 - 2)^2$, donc $x_2^2 + 2x_2 + 1 = x_2^2 - 4x_2 + 4$.

L'équation devient $6x_2 - 3 = 0$, qui est l'équation d'une droite (voir la figure 3). Le point d'intersection avec l'axe x_2 est $x_1 = 0$, $x_2 = 0{,}5$.

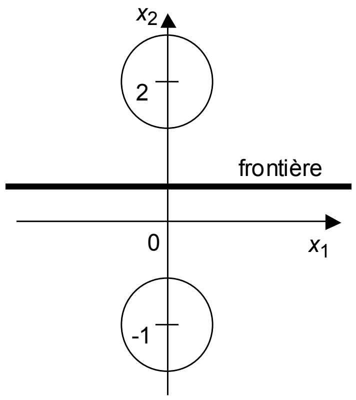


Figure 3. *Frontière de séparation et forme des classes*

iii) La frontière est une droite car dans l'exemple considéré $[\det \mathbf{S}_A]^{1/2}\ \mathbf{S}_A^{-1} = [\det \mathbf{S}_B]^{1/2}\ \mathbf{S}_B^{-1}$, 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).