

1 Principes de l'apprentissage machine

1.1 Modèles utilisés

1.1.1 Analyses discriminantes

Cette étude proposera plusieurs classifieurs s'appuyant sur des méthodes d'analyse discriminante, en particulier l'analyse discriminante linéaire (LDA : *Linear Discriminant Analysis*).

L'analyse discriminante linéaire est une méthode ayant été proposée par Ronald Fisher en 1936¹ pour résoudre des problèmes de classification taxonomique dans le domaine de la botanique.(1,2) La LDA est basée sur la construction de l'hyperplan de projection permettant de maximiser la distance entre les moyennes projetées des différentes classes et de minimiser la variance intraclasse (voir figure 1).(3) La LDA peut être utilisée à fins de classification, mais aussi pour effectuer des réductions de dimensionnalité ou encore afin de faciliter l'interprétation de l'importance de certaines caractéristiques.

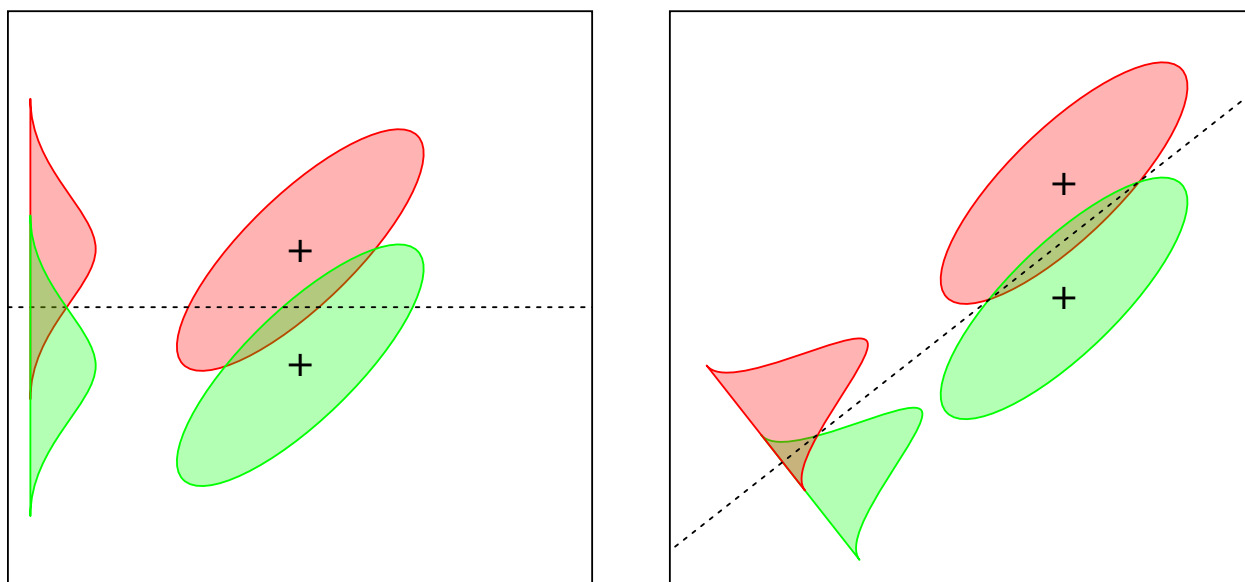


Figure 1: Séparation par distance maximale des moyennes interclasses (à gauche), et par projection sur l'hyperplan optimal tenant compte des variances intraclasse (LDA, à droite)

En pratique, la LDA consiste à construire un indice synthétique, combinaison linéaire des caractéristiques des classes, dont les coefficients permettent de rendre les points du problème original le plus aisément “séparables”. La LDA étant utilisée dans cette étude pour construire un classifieur binaire, c'est ce type de classifieur qui sera présenté dans cette section, et illustré

¹Cette étude, proposant une méthode de classification des variétés *Iris setosa*, *Iris virginica* et *Iris versicolor* est par ailleurs à l'origine du célèbre jeu de données *Iris*.

avec un exemple extrait du jeu de données *Iris*, dans laquelle nous séparerons les espèces *Iris versicolor* et *Iris setosa*.

Dans ce cadre, la LDA vise ainsi à définir la fonction linéaire :

$$X = \sum_{i=1}^n \lambda_i . x_i$$

avec n le nombre de paramètres caractérisant les individus, x_i les caractéristiques mesurées pour chaque individu et chaque paramètre i , et λ_i des coefficients à optimiser, de sorte que la fonction X maximise le rapport entre les différences des moyennes de chaque classe D et la somme des produits des caractéristiques intraclasse S (proportionnelle à la variance intraclasse), définis par :

$$D = \sum_{i=1}^n \lambda_i . d_i$$

avec d_i la différence des caractéristiques moyennes pour chaque paramètre i , et

$$S = \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n \lambda_p . \lambda_q . S_{pq}$$

avec S_{pq} la somme des produits des caractéristiques intraclasse pour chaque combinaison de paramètres p et q .

L'application sur les espèces *Iris versicolor* et *Iris setosa* nous donne les résultats présentés dans les tables 1 et 2 :

Table 1: Moyennes et différences de moyennes des 4 paramètres d'Iris setosa et versicolor

	Long.Sep	Larg.Sep	Long.Pet	Larg.Pet
setosa	5.006	3.428	1.462	0.246
versicolor	5.936	2.770	4.260	1.326
difference	-0.930	0.658	-2.798	-1.080

Table 2: Produits des différences à la moyenne des 4 paramètres d'Iris setosa et versicolor (S_{pq})

	Long.Sep	Larg.Sep	Long.Pet	Larg.Pet
Long.Sep	19.1434	9.0356	9.7634	3.2394
Larg.Sep	9.0356	11.8658	4.6232	2.4746
Long.Pet	9.7634	4.6232	12.2978	3.8794
Larg.Pet	3.2394	2.4746	3.8794	2.4604

La maximisation du rapport entre les carrés des distances des moyennes interclasses et les variances intraclases revient à maximiser D^2/S pour chaque coefficient λ_i soit, par dérivation pour chacun des λ_i :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \frac{D^2}{S} = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{S} \frac{\partial}{\partial \lambda_i} D^2 + D^2 \frac{\partial}{\partial \lambda_i} \frac{1}{S} = 0 \Leftrightarrow \frac{D}{S^2} \left(2S \frac{\partial D}{\partial \lambda_i} - D \frac{\partial S}{\partial \lambda_i} \right) = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{2} \frac{\partial S}{\partial \lambda_i} = \frac{S}{D} \frac{\partial D}{\partial \lambda_i}$$

En supposant que les distributions des classes soient unimodales, cette équation admet une solution unique. Le rapport S/D étant un facteur supposé constant pour tous les coefficients λ_i inconnus, ces coefficients sont donc les solutions du système :

$$\begin{cases} d_1 = S_{11}\lambda_1 + S_{12}\lambda_2 + S_{13}\lambda_3 + S_{14}\lambda_4 \\ d_2 = S_{21}\lambda_1 + S_{22}\lambda_2 + S_{23}\lambda_3 + S_{24}\lambda_4 \\ d_3 = S_{31}\lambda_1 + S_{32}\lambda_2 + S_{33}\lambda_3 + S_{34}\lambda_4 \\ d_4 = S_{41}\lambda_1 + S_{42}\lambda_2 + S_{43}\lambda_3 + S_{44}\lambda_4 \end{cases} \Rightarrow \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{D} \Leftrightarrow \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{D}$$

avec \mathbf{S} la matrice des produits S_{pq} , \mathbf{D} le vecteur des différences des moyennes d_i et $\boldsymbol{\lambda}$ celui des coefficients λ_i .

En indiquant les facteurs :

- $i = 1$ pour la longueur de sépale L_s ,
- $i = 2$ pour la largeur de sépale ℓ_s ,
- $i = 3$ pour la longueur de pétale L_p ,
- $i = 4$ pour la largeur de pétale ℓ_p .

Nous pouvons calculer les coefficients :

$$\begin{cases} \lambda_1 = 0.0311507 \\ \lambda_2 = 0.1839077 \\ \lambda_3 = -0.222104 \\ \lambda_4 = -0.3147364 \end{cases}$$

Soit, après normalisation sur le facteur λ_1 :

$$\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = 5.904 \\ \lambda_3 = -7.13 \\ \lambda_4 = -10.104 \end{cases}$$

$$X = L_s + 5.904 \cdot \ell_s - 7.13 \cdot L_p - 10.104 \cdot \ell_p$$

Le seuil de séparation est alors défini par :

$$X_{sep.} = \frac{\overline{X_{ver.}} + \overline{X_{set.}}}{2}$$

Avec $\overline{X_{ver.}}$ et $\overline{X_{set.}}$ les moyennes respectives des X pour *Iris setosa* et *Iris versicolor*.

La valeur absolue des coefficients λ_i calculés précédemment nous indique la pondération de chaque caractère dimensionnel dans l'indice synthétique X permettant d'obtenir une séparation optimale, ainsi que l'illustrent les figures 2 et 3.

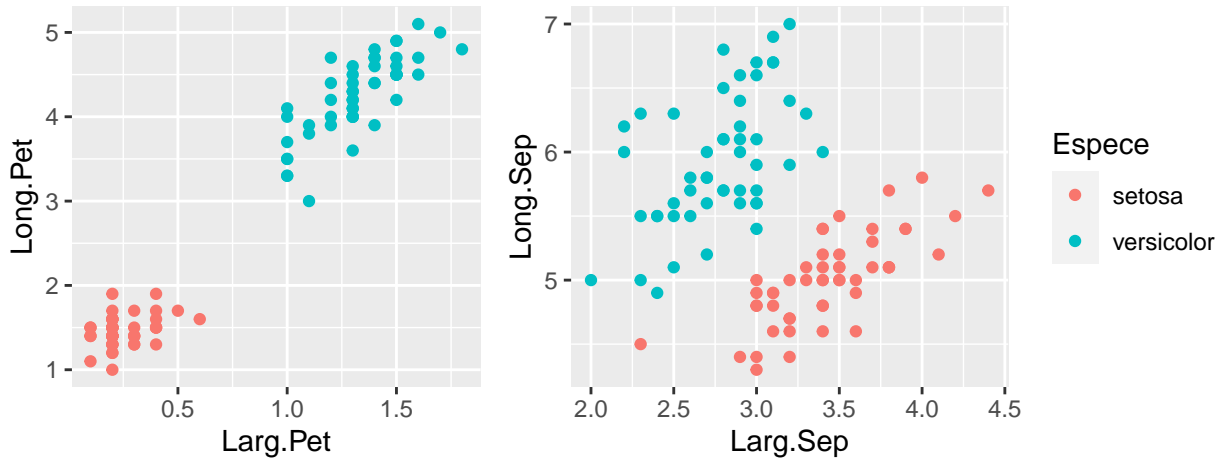


Figure 2: Distribution des variétés setosa et versicolor en fonction de leurs caractéristiques (paramètres fortement pondérés à gauche, faiblement pondérés à droite)

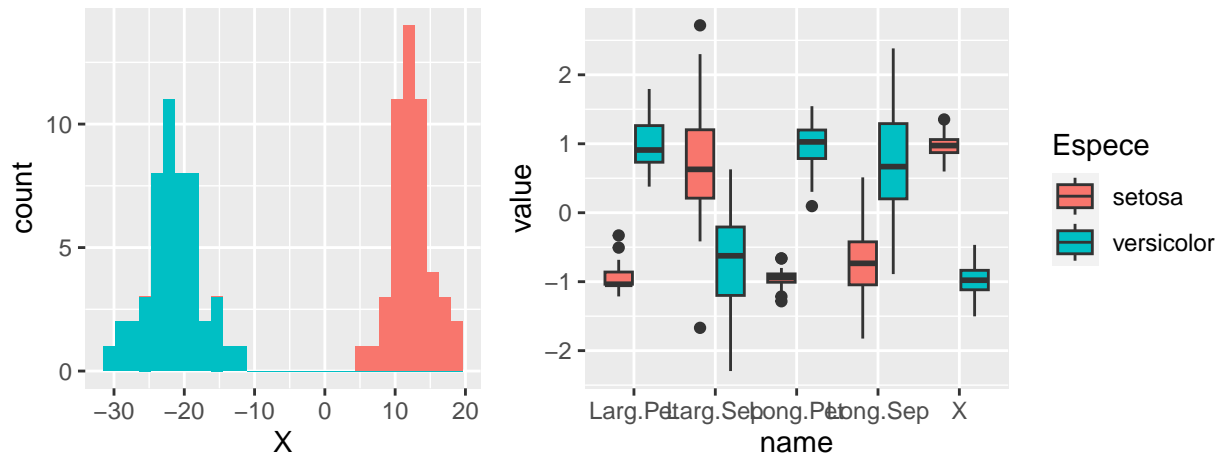


Figure 3: Distribution de X (à gauche) et des paramètres dimensionnels normalisés (à droite) en fonction des espèces

1.1.2 Arbres de décision

etc.

Mini-Bibliographie

1. Fisher RA. The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems. *Annals of Eugenics* [Internet]. 1936;7(2):179-88. Disponible sur: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1469-1809.1936.tb02137.x>
2. Anderson TW. R. A. Fisher and Multivariate Analysis. *Statistical Science* [Internet]. 1996;11(1):20-34. Disponible sur: <https://www.jstor.org/stable/2246198>
3. Hastie T, Tibshirani R, Friedman J. *The Elements of Statistical Learning - Data Mining, Inference, and Prediction*. 2nd éd. Springer; 2016. (Springer Series in Statistics).