

COURS DE DATA MINING

Dr. Longin NDAYISABA

Université du Burundi

Master 2 Génie Informatique

Mars 2015

TABLE DES MATIERES

AVANT-PROPOS.....	5
I. Introduction.....	12
I.1. Objectif.....	12
I.1.1. Communautés impliquées par Data Mining.....	13
I.1.2. Tâches de Data Mining.....	13
I.2. Contenu.....	14
II. DESCRIPTION STATISTIQUE ELEMENTAIRE	16
II.1. Exemple de données.....	16
II.2. Introduction	17
II.3. Description d'une variable	19
II.3.1. Cas quantitatif.....	19
II.3.2. Cas qualitatif.....	22
II.4. Liaison entre variables.....	22
II.4.1 Deux variables quantitatives	23
II.4.2 Une variable quantitative et une qualitative.....	25
II.4.3. Deux variables qualitatives	27
II.5. Vers le cas multidimensionnel	31
II.5.1. Matrices des covariances et des corrélations	31
II.5.2 Tableaux de nuages	31
II.5.3 La matrice des coefficients de Tschuprow (ou de Cramer)	31
II.6. Problèmes	32
III. ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES	33
III.1. introduction	33
III.2. Présentation élémentaire de l'ACP	34
III.2.1 Les données.....	34
III.2.2. Résultats préliminaires.....	35
III.2.3. Résultats généraux	36
III.2.4. Résultats sur les variables	37
III.2.5 Résultats sur les individus.....	39

III.3. Représentation vectorielle des données quantitatives.....	42
III.3.1. Notations	42
III.3.2 Interprétation statistique de la métrique des poids	43
III.3.3. La méthode.....	43
III.4. Modèle.....	44
III.4.2 Définition équivalente.....	47
III.5. Représentations graphiques.....	48
III.5.1. Les individus	48
III.5.2. Les variables	51
III.5.3. Représentation simultanée ou “biplot”	53
III.6. Choix de dimension.....	54
III.6.1. Part d’inertie.....	54
III.6.2. Règle de Kaiser	55
III.6.3. Eboulis des valeurs propres	55
III.6.4. Boîtes-à-moustaches des variables principales.....	56
III.6.5. Stabilité du sous-espace	56
III.7. Interprétation	59
IV. OPTIMISATION ET RECHERCHE OPERATIONNELLE	60
IV.1. Problème d’optimisation sans contraintes	60
IV.1.1. Fonction à une seule variable	61
IV.1.2. Fonction à <i>n</i> variables	64
IV.2. Problème d’optimisation sous contraintes	68
IV.3. Programmation quadratique.....	75
IV.4. Méthodes numériques d’optimisation des fonctions unimodales.....	81
IV.4.1. Méthode passive de recherche du minimum	82
IV.4.2. Méthodes actives de recherche du minimum	84
IV.5. Les méthodes du gradient	91
IV.5.1. Méthode du gradient à pas variable.....	92
IV.5.2. Méthode du gradient optimal.....	94
IV.6 Méthode de programmation approximative.....	97

V. L'ANALYSE DE LA RELATION ENTRE DEUX VARIABLES	107
V. 0. La corrélation et la régression courbes.....	107
V.1. Les grands types de modèles et de courbes.....	107
V.1.1. Le modèle linéaire : <i>le rapport proportionnel</i>	107
V.1.2. Le modèle puissance : le rapport relatif constant ou le lien alcoométrique	108
V.1.3. La loi de Gibrat : la loi de l'effet proportionnel.....	109
V.1.4. Le modèle polynomial	109
V.2. Le choix du modèle et de la courbe	110
V.3. La linéarisation	112
V.4. La corrélation et la régression linéaires	115
V.5. La régression polynomiale	115
V.6. La corrélation et la régression multiples	117
V.6.1. Le modèle.....	118
V.6.2. La résolution.....	119
V.6.2.1. La corrélation multiple.....	119
VI. SEGMENTATION (CLUSTERING).....	121
VI.1. Problématique de la segmentation	121
VI.2. Qualité de la segmentation.....	121
VI.3. Application pratique du clustering.....	121
VI.4. Mesure de la similarité.....	122
VI.4.1. Choix de la distance.....	122
VI.4.2. Combinaison des distances	122
VI.4.3. Calcul de la distance pour les données binaires	123
VI.4.4. Calcul de la distance pour les données énumératives.....	124
VI.5. Algorithme des k -moyennes (k -means).....	125
VI.6. Méthodes hiérarchiques de segmentation	125
VI.6.1. Algorithme des méthodes hiérarchiques de segmentation	125
VI.6.2. Arbre de clusters	125
VI.6.3. Treillis de concepts	126

VI.6.4. Les avantages des méthodes hiérarchiques	128
VI.7. Les méthodes basées sur la densité.....	128
VII. CLASSIFICATION.....	129
VII.1. Validation de la Classification (accuracy).....	130
VII.2. Méthode des plus proches voisins	131
VII.3. Arbres de décision	132
VII.3.1. De l'arbre de décision aux règles de classification	135
VII.3.2. Génération de l'arbre de décision.....	136
VII.3.3. Surspécialisation de l'arbre de décision	137
VIII. REGLES D'ASSOCIATION	138
VIII.1. Identification générale des règles d'association.....	138
VIII.2. Exemple d'identification des règles d'association à partir d'une base des données	140

AVANT-PROPOS

Motivations du data mining

Le développement des moyens informatiques et de calcul permet le stockage (bases des données), le traitement et l'analyse d'ensembles des données très volumineux. Plus récemment, le perfectionnement des interfaces offrent aux utilisateurs, statisticiens ou non, des possibilités de mise en œuvre très simples des outils logiciels. Cette évolution, ainsi que la popularisation de nouvelles méthodes algorithmiques (réseaux de neurones, support vector machine...) et outils graphiques, conduit au développement et à la commercialisation des logiciels intégrant un sous-ensemble des méthodes statistiques et algorithmiques sous la terminologie de Data Mining: la prospection ou fouille des données. Cette approche, issue du marketing spécialisé dans la gestion de la relation client (GRC) (Customer Relationship Management ou CRM) trouve également des développements et applications industrielles en contrôle de qualité ou même dans certaines disciplines scientifiques dès lors que les ingénieurs et chercheurs sont confrontés à un volume des données important. Besse et col. (2001) présente une introduction détaillée de cette démarche et des relations qu'elle entretient avec les disciplines

traditionnelles Statistique et Informatique. L'accroche publicitaire souvent citée par les éditeurs de logiciels (SAS) est:

Comment trouver un diamant dans un tas de charbon sans se salir les mains.

On propose d'évaluer et d'expérimenter la réalité de cette annonce qui s'adresse à un marché en pleine expansion. Les entreprises sont en effet très motivées pour tirer parti et amortir, par une aide à la décision quantifiée, les coûts de stockage des teras octets que leur service informatique s'emploie à administrer.

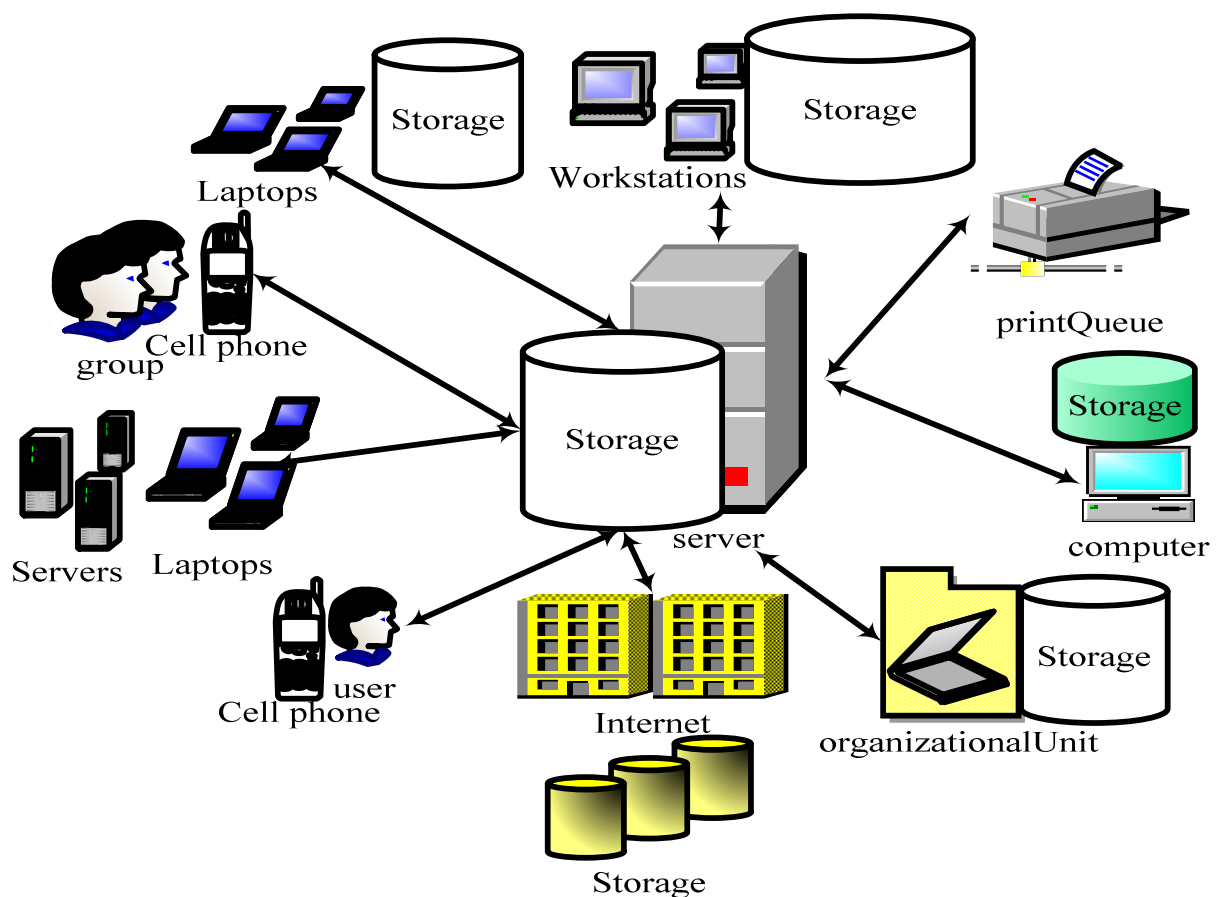
Le contexte informationnel de la fouille des données est celui des data warehouses. Un entrepôt des données, dont la mise en place est assurée par un gestionnaire des données (data manager) est un ensemble de bases relationnelles extraites des données brutes de l'entreprise et relatives à une problématique:

- gestion des stocks (flux tendu), des ventes d'un groupe afin de prévoir et anticiper au mieux les tendances du marché;
- suivi des fichiers clients d'une banque, d'une assurance, associés à des données socio-économiques (INSEE), à l'annuaire, en vue de la constitution d'une segmentation (typologie) pour cibler des opérations de marketing ou des attributions de crédit. La *gestion de la relation client* vise à une individualisation ou personnalisation de la production et de la communication afin d'évacuer la notion de *client moyen*;
- recherche, spécification puis ciblage des *niches* de marché les plus profitables (banque) ou au contraire les plus risquées (assurance);
- suivi en ligne des paramètres de production (traçabilité) en contrôle de qualité pour détecter au plus vite l'origine d'une défaillance;
- prospection textuelle (text mining) et veille technologique;
- web mining et comportement des internautes;
- ...

Cet environnement se caractérise par:

- Une informatique hétérogène faisant intervenir des sites distants (Unix, Dos, NT, VM,...) à travers le réseau de l'entreprise (intranet) ou même des accès extérieurs (internet). Des contraintes d'efficacité, de fiabilité ou de sécurité conduisent à répartir, stocker l'information à la source plutôt qu'à la dupliquer systématiquement ou à la centraliser;

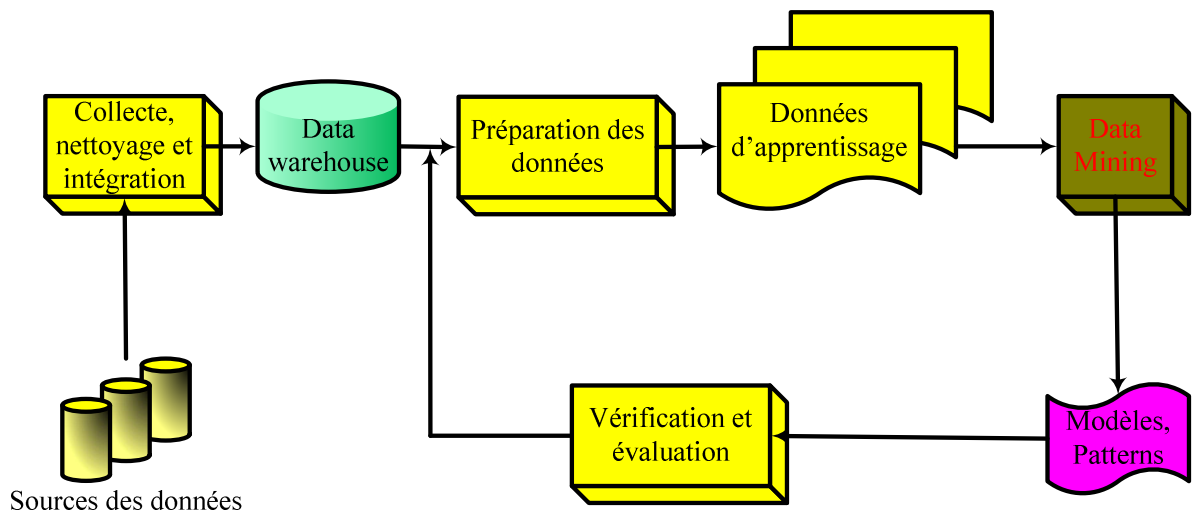
- L'incompatibilité logique des informations observées sur des échantillons différents ne présentant pas les mêmes strates, les mêmes codifications.
- Des volumes et flux considérables de données issues de saisies automatisées et chiffrés en téra-octets;
- Contrairement à une démarche statistique traditionnelle (planification de l'expérience), les données analysées sont stockées à d'autres fins (comptabilité, contrôle de qualité...) et sont donc préalables à l'analyse;
- La nécessité de ne pas exclure à priori un traitement exhaustif des données afin de ne pas laisser échapper, à travers le crible d'un sondage, des groupes de faibles effectifs mais à fort impact économique.



Sources hétérogènes des masses importantes des données

On rappelle que Data Mining est au cœur de KDD (Knowledge Data Discovery).

Le processus de découverte de connaissances est représenté par le schéma suivant:



Le processus de découverte de connaissances

Par *données* on entend des valeurs des champs des enregistrements des tables de l'entrepôt des données.

Les principaux types des données sont:

- Données discrètes: données binaires (sexe, ...), données énumératives (couleur, ...), énumératives ordonnées (réponses: 1: très satisfait, 2: satisfait, ...).
- Données continues: données entières ou réelles (âge, salaire, ...)
- Dates
- Données textuelles
- Pages/liens web, Multimédia, ...

Démarche méthodologique de Data Mining

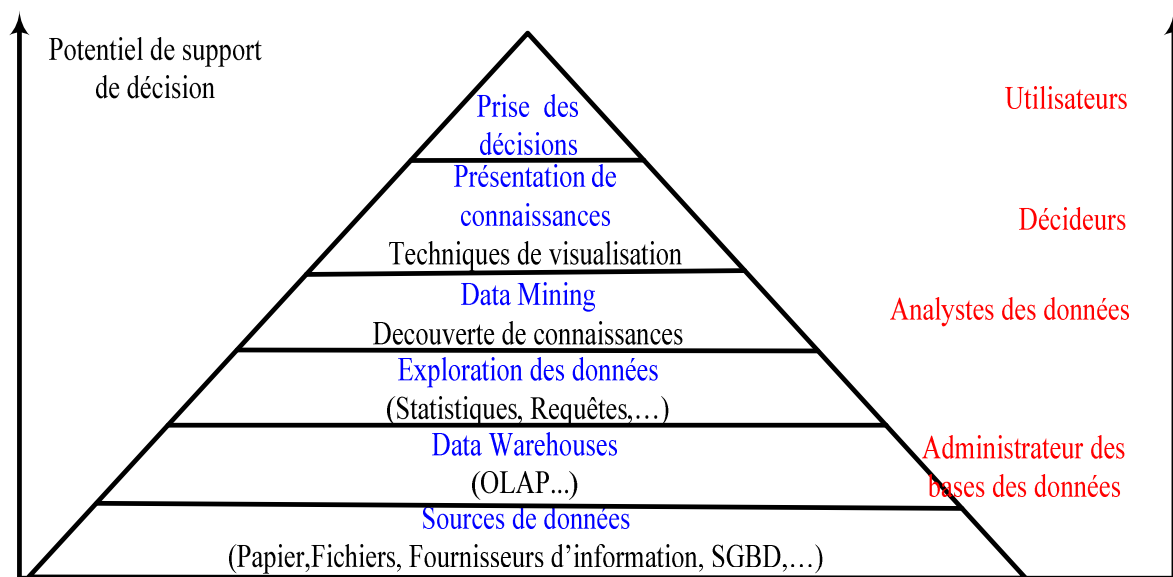
La démarche méthodologique de Data Mining comprend les étapes suivantes:

- Comprendre l'application. Il faut identifier les connaissances à priori, les objectifs, etc.
- Sélectionner un échantillon de données. Il faut choisir une méthode d'échantillonnage.
- Nettoyage et transformation des données. Supprimer le «bruit»: données superflues, marginales, données manquantes, etc. Effectuer une sélection d'attributs, réduire la dimension du problème, etc.
- Appliquer les techniques de fouille de données. Choisir le bon algorithme

- Visualiser, évaluer et interpréter les modèles découverts. Analyser la connaissance (intérêt), vérifier sa validité (sur le reste de la base de données) et réitérer le processus si nécessaire.
- Gérer la connaissance découverte. La mettre à la disposition des décideurs, l'échanger avec d'autres applications (système expert, ...), etc.

La place de Data Mining dans le processus de prise des décisions

La place de Data Mining dans le processus de prise des décisions est reflétée par le schéma suivant:



La place de Data Mining dans le processus de prise des décisions

Stratégie de data mining

Dans tout ce qui suit, on dispose d'un ensemble d'observations. Les caractéristiques ou variables $X = (X^1, \dots, X^p)$ dites explicatives ont été observées sur un ensemble de n objets, individus ou unités statistiques. Un premier travail, souvent fastidieux mais incontournable, consiste à mener une exploration statistique de ces données: allure des distributions, présence de données atypiques, corrélations et cohérence, transformations éventuelles des données, description multidimensionnelle, classification. C'est l'objet de la première partie de ce cours. La deuxième partie décrit les outils de modélisation statistique ou encore d'apprentissage utilisables pour la modélisation à fin de prédiction d'une variable *cible* Y par les *variables explicatives* X^j .

L'enchaînement de ces étapes (exploration puis apprentissage) constitue le fondement de la fouille des données.

Pour comprendre la structure et bien appréhender le contenu de ce cours, il est important d'intégrer rapidement ce qu'est la stratégie à mettre en œuvre pour aboutir au bon apprentissage ou encore au bon *modèle prédictif* recherché à partir des données observées.

Attention, contrairement à une démarche statistique traditionnelle dans laquelle l'observation des données est intégrée à la méthodologie (planification de l'expérience), les données sont ici *préalables* à l'analyse. Néanmoins il est clair que les préoccupations liées à leur analyse et à son objectif doivent intervenir le plus en amont possible pour s'assurer quelques chances de succès.

Les principales étapes de la fouille des données sont:

- i. Extraction des données avec ou sans échantillonnage faisant référence aux techniques de sondage appliquées ou applicables aux bases des données.
- ii. Exploration des données pour la détection des valeurs aberrantes ou seulement atypiques, d'incohérences, pour l'étude des distributions des structures de corrélation, recherche des typologies, pour des transformations des données...
- iii. Partition aléatoire de l'échantillon (apprentissage, validation, test) en fonction de sa taille et des techniques qui seront utilisées pour estimer une erreur de prédiction en vue des choix de modèle, choix et certification de méthode.
- iv. Pour chacune des méthodes considérées: modèle linéaire général (gaussien, binomial ou poissonien), discrimination paramétrique (linéaire ou quadratique) ou non paramétrique, k plus proches voisins, arbre, réseau de neurones (perceptron), support vecteur machine, combinaison des modèles (bagging, boosting). On doit:
 - estimer le modèle pour une valeur donnée d'un paramètre de complexité: nombre de variables, de voisins, de feuilles, de neurones, durée de l'apprentissage, largeur de fenêtre...;
 - optimiser ce paramètre (sauf pour les combinaisons de modèles affranchies des problèmes de sur-apprentissage) en fonction de la technique d'estimation de l'erreur retenue : échantillon de validation, validation croisée, approximation par pénalisation de l'erreur d'ajustement.

- v. Comparaison des modèles optimaux obtenus (un par méthode) par estimation de l'erreur de prévision sur l'échantillon test ou, si la présence d'un échantillon test est impossible, sur le critère de pénalisation de l'erreur s'il en existe une version pour chacune des méthodes considérées.
- vi. Itération éventuelle de la démarche précédente (validation croisée), si l'échantillon test est trop réduit, depuis (iii). Partitions aléatoires successives de l'échantillon pour moyenner sur plusieurs cas l'estimation finale de l'erreur de prédiction et s'assurer de la robustesse du modèle obtenu.
- vii. Choix de la méthode retenue en fonction de ses capacités de prédiction, de sa robustesse mais aussi, éventuellement, de l'interprétabilité du modèle obtenu.

Objectif

L'objet de ce cours est d'introduire, sous une forme homogène et synthétique, les principales techniques d'exploration, de modélisation ou encore d'apprentissage utilisées le plus couramment en fouille des données et citées dans la section précédente. Il a fallu faire des choix dans l'ensemble des techniques proposées et leurs nombreuses modifications. La forme et le contenu permettent aux étudiants de Master de se faire une idée du nombre très important de méthodes et variantes concernées par l'apprentissage supervisé ou non supervisé en consultant une boîte à outil Matlab de classification. Il faut remarquer que les principaux logiciels commerciaux (SAS, Splus, SPSS, Matlab, ...) ou gratuits (R), performants et s'imposant par des interfaces très conviviales (Enterprise Miner, Insightfull Miner, Clementine), contribuent largement à la diffusion, voire la pénétration, de méthodes très sophistiquées dans des milieux imperméables à une conceptualisation mathématique trop abstraite.

Le choix a été fait de conserver et expliciter, dans la mesure du possible, les concepts originaux de chaque méthode dans son cadre disciplinaire tout en tâchant d'homogénéiser les notations et terminologies. L'objectif principal est de faciliter la compréhension et l'interprétation des techniques des principaux logiciels pour en faciliter une utilisation pertinente et réfléchie.

D'une façon générale les principaux objectifs du cours sont:

- 1) Développer des techniques et systèmes efficaces et extensibles pour l'exploration des données distribuées et des bases des données larges et multidimensionnelles.
- 2) Faciliter l'utilisation des systèmes de Data Mining par limitation de l'intervention de l'utilisateur, représentation simple de la connaissance et visualisation de la connaissance sous forme une exploitable.

I. Introduction

I.1. Objectif

Toute étude sophistiquée d'un corpus de données doit être précédée d'une étude *exploratoire* à l'aide d'outils, certes rudimentaires mais robustes, en privilégiant les représentations graphiques. C'est la seule façon de se familiariser avec des données et surtout de dépister les sources des problèmes:

- valeurs manquantes, erronées ou atypiques;
- modalités trop rares;
- distributions "anormales" (dissymétrie, multimodalité, épaisseur des queues);
- incohérences, liaisons non linéaires.
- ...

C'est ensuite la recherche de prétraitements des données afin de les rendre conformes aux techniques de modélisation ou d'apprentissage qu'il sera nécessaire de mettre en œuvre afin d'atteindre les objectifs fixés:

- transformation: logarithme, puissance, réduction, rangs,... des variables;
- codage en classe ou recodage de classes;
- imputations ou non des données manquantes;
- lissage et décomposition des courbes;
- réduction de dimension, classification et premier choix de variables;
- classification ou typologie des observations.

Attention, le côté rudimentaire voire trivial de ces outils ne doit pas conduire à les négliger au profit d'une mise en œuvre immédiate de méthodes beaucoup plus sophistiquées, donc beaucoup plus sensibles aux problèmes cités ci-dessus. S'ils ne sont pas pris en compte, ils réapparaîtront alors comme autant d'*artefacts* susceptibles de dénaturer voire de fausser toute tentative de modélisation.

I.1.1. Communautés impliquées par Data Mining

Les principales communautés impliquées par le Data Mining sont:

- Intelligence artificielle et apprentissage
- Bases des données
- Analyse des données (statistiques)
- Visualisation
- ***Recherche opérationnelle et optimisation***
- Informatique parallèle et distribuée
- Etc.

Data Mining et Statistiques

La principale finalité de Data Mining est exploratoire (Data-driven modeling)

La principale finalité des statistiques est confirmatoire (User-driven modeling). Les principaux problèmes qu'on peut résoudre à l'aide des statistiques sont:

- Distribution d'une seule variable : moyenne, médiane, variance, écart-type, ...
- Exploration des relations entre variables : coefficient de corrélation, ...
- Découverte de la cause des relations simples entre de nombreuses variables.
- test de χ^2 , ...
- Réseaux bayésiens (probabilités conditionnelles)
- Etc.

I.1.2. Tâches de Data Mining

Les principales tâches de Data Mining sont:

- 1) *Clustering (Segmentation)*. Partitionnement logique de la base des données en clusters. Par clusters on entend des groupes d'instances ayant les mêmes caractéristiques. Le problème de segmentation peut être résolu à l'aide de l'apprentissage non supervisé (les classes ne sont pas connues d'avance). Le clustering s'achève par l'interprétation des clusters identifiés. La segmentation est utilisée en économie (segmentation des marchés), médecine (localisation des tumeurs dans le cerveau), etc.

- 2) *Classification*. Elle permet de prédire si une instance de données est membre d'un groupe ou d'une classe prédéfinie. Par classes on entend des groupes d'instances avec des profils particuliers. Le problème de classification peut être résolu à l'aide de l'apprentissage supervisé (les classes sont connues d'avance). La classification est utilisée en marketing direct (identification des profils des consommateurs), grande distribution (classement des clients), médecine (malades/non malades), etc.
- 3) *Recherche d'associations*. Corrélations (ou relations) entre attributs (méthode non supervisée). La recherche d'associations est utilisée en grande distribution, gestion des stocks, web (pages visitées), etc.
- 4) *Recherche de séquences*. L'identification des liaisons entre événements sur une période de temps. C'est l'extension des règles d'association par prise en compte du temps (série temporelle). Par exemple l'achat d'une télévision implique l'achat d'un magnétoscope d'ici cinq ans. La recherche des séquences est utilisée en marketing direct (anticipation des commandes), bioinformatique (séquences d'ADN, par exemple, ACGTC est suivie par GTCA après un gap de 9, avec une probabilité de 30%), bourse (prédiction des valeurs des actions).
- 5) *Détection de déviation*. Identification des instances ayant des caractéristiques les plus différentes des autres. La technique est basée sur la notion de distance entre instances. Le problème peut être exprimée temporellement (évolution des instances) et spatialement (caractéristique d'un cluster d'instances). La détection de déviation est utilisée en détection de fraudes (transactions avec une carte bancaire inhabituelle en télémarketing). La détection de déviation se caractérise par bruit ou exception (donc connaissance intéressante).

I.2. Contenu

Cette partie se propose tout d'abord d'introduire brièvement les techniques permettant de résumer les caractéristiques (tendance centrale, dispersion, boîte à moustaches, histogramme, estimation non paramétrique) d'une variable statistique ou les relations entre variables de même type quantitatif (coefficient de corrélation, nuage des points, ou qualitatif (χ^2 , Cramer, Tchuprow) ou des types différents (rapport de corrélation, diagrammes en boîtes parallèles). Les notions présentées sont illustrées sur un jeu des données typique d'un score d'appétence en marketing bancaire.

Après cette approche uni et bidimensionnelle, les techniques multidimensionnelles sont décrites et illustrées. Elles diffèrent selon le type des variables considérées mais permettent toutes de réduire la dimension afin de résumer un tableau ($n \times p$) de grande dimension et révéler ses caractéristiques. L'analyse en composantes principales (ACP) pour les variables quantitatives, l'analyse des correspondances simples ou multiples (AFCM) pour les variables qualitatives. L'analyse factorielle discriminante (AFD) permet de juger de la qualité de discrimination d'un ensemble de variables quantitatives afin d'expliquer une typologie décrite par une variable qualitative. Lorsqu'une typologie est recherchée, les méthodes de classification (hiérarchiques ou par réallocation dynamique) déterminent une variable qualitative définissant une partition de l'ensemble des données. D'autres techniques sont plus spécifiques, le positionnement multidimensionnel ou ACP sur tableau des distances est adapté à des données particulières mais permet également de structurer un ensemble de variables trop important.

Le Data Mining est un processus inductif, itératif et interactif de découverte dans les bases des données larges de modèles des données valides, nouveaux, utiles et compréhensibles.

- Itératif: nécessite plusieurs passes
- Interactif: l'utilisateur est dans la boucle du processus
- Valides: valables dans le futur
- Nouveaux: non prévisibles
- Utiles: permettent à l'utilisateur de prendre des décisions
- Compréhensibles: présentation simple

En Data Mining on utilise les notions de déduction, d'induction et d'abduction pour formuler des conclusions.

Déduction: Raisonnement qui conclut à partir de prémisses et d'hypothèses à la vérité d'une proposition en usant des règles d'inférence.

Exemple :

Toutes les voitures ont 4 roues.

La Peugeot 206 est une voiture.

==> La Peugeot 206 a 4 roues.

Induction: Généralisation d'une observation ou d'un raisonnement établis à partir de cas singuliers. Utilisée en Data Mining (tirer une conclusion à partir d'une série de faits, pas sûre à 100%).

Exemple:

La clio a 4 roues

La Peugeot 106 a 4 roues

La BMW M3 a 4 roues

La Mercedes 190 a 4 roues

==> Toutes les voitures ont 4 roues

Abduction: elle beaucoup utilisée en diagnostic médical, Marketing,...

Exemple:

Toutes les voitures ont 4 roues

La Peugeot 206 a 4 roues

==> La Peugeot 206 est une voiture

II. DESCRIPTION STATISTIQUE ELEMENTAIRE

II.1. Exemple de données

Un même ensemble des données bancaires va servir à illustrer la plupart des outils et méthodes décrits dans ce document. En voici le descriptif sommaire.

Le service marketing d'une banque dispose de fichiers décrivant ses clients et leurs comportements (mouvements, soldes des différents comptes). Deux types d'études sont habituellement réalisés sur des données bancaires ou même plus généralement dans le tertiaire afin de personnaliser les relations avec les clients.

- i. une classification ou segmentation de la clientèle permettant de déterminer quelques classes ou segments de comportements types.

- ii. l'estimation d'un score en vue d'un objectif particulier. Il s'agit ici de prévoir l'intérêt ou l'*appétence* d'un client pour le produit bancaire carte Visa Premier. C'est une carte de paiement haut de gamme qui cherche à renforcer le lien de proximité avec la banque en vue de fidéliser une clientèle aisée.

La liste des variables est issue d'une base des données retraçant l'historique mensuel bancaire et les caractéristiques de tous les clients. Un sondage a été réalisé afin d'alléger les traitements ainsi qu'une première sélection des variables. Les variables contenues dans le fichier sont explicitées dans le tableau 2.1. Elles sont observées sur un échantillon de 1425 clients.

II.2. Introduction

L'objectif des outils de Statistique descriptive élémentaire est de fournir des résumés synthétiques des séries des valeurs, adaptées à leur type (qualitatives ou quantitatives), et observées sur une population ou un échantillon.

Dans le cas d'une seule variable, Les notions les plus classiques sont celles de médiane, moyenne, fréquence, variance, écart-type définies parallèlement à des représentations graphiques: diagramme en bâton, histogramme, diagramme-boîte, graphiques cumulatifs, diagrammes en colonnes, en barre ou en secteurs.

Dans le cas de deux variables, on s'intéresse à la corrélation, au rapport de corrélation ou encore à la statistique d'un test du χ^2 associé à une table de contingence. Ces notions sont associées à différents graphiques comme le nuage des points (scatterplot), les diagrammes-boîtes parallèles, les diagrammes de profils ou encore en mosaïque.

TAB. 2.1 – Libellés des variables des données bancaires.

Identif.	Libellé
matric	Matricule (identifiant client)
depts	Département de résidence
pvs	Point de vente
sexec	Sexe (qualitatif)
ager	Age en années
relat	Ancienneté de relation en mois
prcsp	Catégorie socio-professionnelle (code num)
quals	Code "qualité" client évalué par la banque

GxxGxxS	plusieurs variables caractérisant les interdits bancaires
impnbs	Nombre d'impayés en cours
rejets	Montant total des rejets en francs
opgnb	Nombre d'opérations par guichet dans le mois
moyrv	Moyenne des mouvements nets créditeurs des 3 mois
tavep	Total des avoirs épargne monétaire en francs
endet	Taux d'endettement
gaget	Total des engagements en francs
gagéc	Total des engagements court terme en francs
gagem	Total des engagements moyen terme en francs
kvunb	Nombre de comptes à vue
qsmoy	Moyenne des soldes moyens sur 3 mois
qcred	Moyenne des mouvements créditeurs
dmvtp	Age du dernier mouvement (en jours)
boppn	Nombre d'opérations à M-1
facan	Montant facturé dans l'année en francs
lgagt	Engagement long terme
vienb	Nombre de produits contrats vie
viemt	Montant des produits contrats vie en francs
uemnb	Nombre de produits épargne monétaire
uemmts	Montant des produits d'épargne monétaire en francs
xlgnb	Nombre de produits d'épargne logement
xlgmt	Montant des produits d'épargne logement en francs
ylvnb	Nombre de comptes sur livret
ylvmt	Montant des comptes sur livret en francs
nbelts	Nombre de produits d'épargne long terme
mtelts	Montant des produits d'épargne long terme en francs
nbcats	Nombre de produits épargne à terme
mtcats	Montant des produits épargne à terme
nbbecs	Nombre de produits bons et certificats
mtbecs	Montant des produits bons et certificats en francs
rocnb	Nombre de paiements par carte bancaire à M-1
jntca	Nombre total des cartes
nptag	Nombre de cartes point argent
segv2s	Segmentation version 2
itavc	Total des avoirs sur tous les comptes
havef	Total des avoirs épargne financière en francs
dnbjd1s	Nombre de jours à débit à M
dnbjd2s	Nombre de jours à débit à M-1
dnbjd3s	Nombre de jours à débit à M-2
famil	Situation familiale (Fmar: marié, Fcel: célibataire, Fdiv: divorcé, Fuli: union libre, Fsep: séparé de corps, Fveu: veuf)
carvp	Possession de la carte VISA Premier

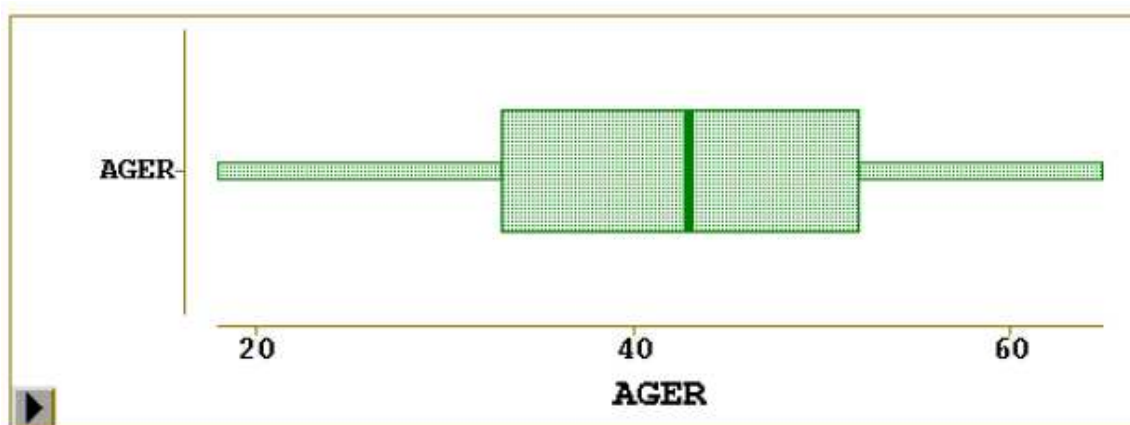


FIG. 2.1 – Diagramme-boîte illustrant la distribution des âges des clients.

Les définitions de ces différentes notions se trouvent dans n'importe quel ouvrage élémentaire de Statistique, on se propose simplement de rappeler dans ce chapitre certains outils moins classiques mais efficaces et présents dans la plupart des logiciels statistiques. Cela permettra également d'illustrer les premières étapes exploratoires à réaliser sur un jeu des données.

II.3. Description d'une variable

II.3.1. Cas quantitatif

Une variable quantitative prend des valeurs entières ou réelles, elle est dite alors discrète ou continue. Cette propriété ayant des incidences sur la nature de sa distribution et donc sur les graphiques associées. On s'intéressera surtout aux variables continues.

La distribution d'un variable statistique quantitative est résumée par différents indicateurs empiriques de *tendance centrale* (moyenne $\bar{x} = \sum_{i=1}^n w_i x_i$, médiane) ou de *dispersion* (écart-type σ , intervalle inter-quartiles). D'autres indicateurs s'intéressent à la dissymétrie (skewness, associée au moment d'ordre 3) ou encore à l'aplatissement (kurtosis à partir du moment d'ordre 4).

Deux graphiques permettent de rendre compte précisément de la nature de la distribution. La statistique de Kolmogorov est la plus couramment utilisée pour tester l'adéquation à une loi (normale).

Diagramme-boîte (box-and-whiskers plot)

Il s'agit d'un graphique très simple qui résume la série à partir de ses valeurs extrêmes, de ses quartiles et de sa médiane.

Histogramme

Dans le cas d'un échantillon, on cherche à approcher par une estimation empirique le graphe de la densité de la loi théorique associée à la population. L'*histogramme* en est un exemple. Une fois déterminé un découpage en classes de l'ensemble des valeurs et les fréquences f_ℓ d'occurrences de ces classes, un histogramme est la juxtaposition des rectangles dont les bases sont les amplitudes des classes considérées ($a_\ell = b_\ell - b_{\ell-1}$) et dont les hauteurs sont les quantités $\frac{f_\ell}{b_\ell - b_{\ell-1}}$, appelées *densités de fréquence*. L'aire du ℓ -ème rectangle vaut donc f_ℓ , fréquence de la classe correspondante.

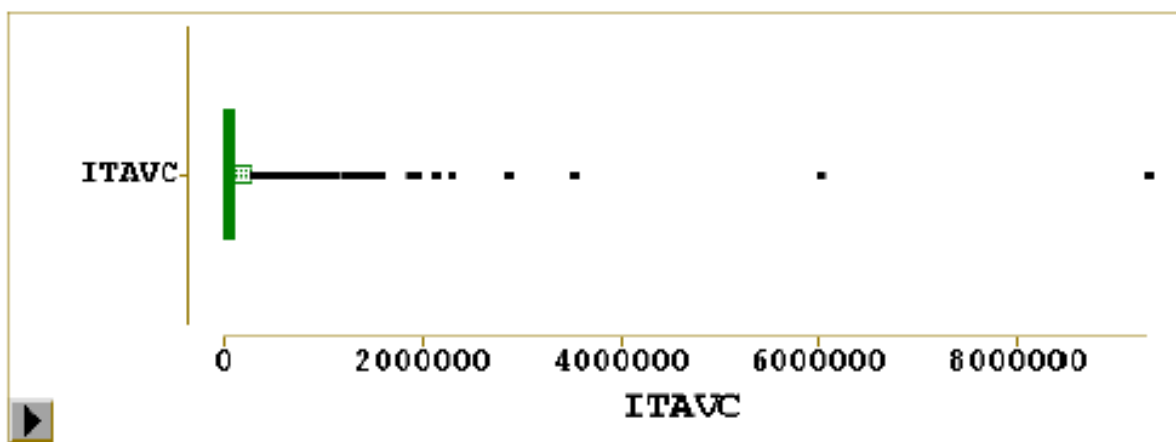


FIG. 2.2 – Diagramme-boîte illustrant la distribution de la variable cumulant les totaux des avoirs. Celle-ci apparaît comme très dissymétrique et avec de nombreuses valeurs atypiques. Une transformation s'impose.

Estimation fonctionnelle

La qualité de l'estimation d'une distribution par un histogramme dépend beaucoup du découpage en classe. Malheureusement, plutôt que de fournir des classes d'effectifs égaux et donc de mieux répartir l'imprécision, les logiciels utilisent des classes d'amplitudes égales et tracent donc des histogrammes parfois peu représentatifs. Ces 20 dernières années, à la suite du développement des moyens de calcul, sont apparues des méthodes d'estimation dites *fonctionnelles* ou *non paramétriques* qui proposent d'estimer la distribution d'une variable ou la relation entre deux variables par une fonction construite point par point (noyaux) ou dans une base de fonctions *splines*. Ces estimations sont simples à calculer (pour l'ordinateur) mais nécessitent le choix d'un paramètre dit de *lissage*. Les démonstrations du caractère optimal de ces

estimations fonctionnelles, liée à l'optimalité du choix de la valeur du paramètre de lissage, font appel aux outils théoriques d'optimisation plus sophistiqués.

L'estimation de la densité par la méthode du noyau se met sous la forme générale:

$$\hat{g}_\lambda(x) = \frac{1}{n\lambda} K\left(\frac{x - x_i}{\lambda}\right)$$

où λ est le paramètre de lissage optimisée par une procédure automatique qui minimise une approximation de l'erreur quadratique moyenne intégrée (norme de l'espace L^2); K est une fonction symétrique, positive, concave, appelée *noyau* dont la forme précise importe peu. C'est souvent la fonction densité de la loi gaussienne:

$$K(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)$$

qui possède de bonnes propriétés de régularité. Le principe consiste simplement à associer à chaque observation un «élément de densité» de la forme du noyau K et à sommer tous ces éléments. Un histogramme est une version particulière d'estimation dans laquelle «l'élément de densité» est un «petit rectangle» dans la classe de l'observation.

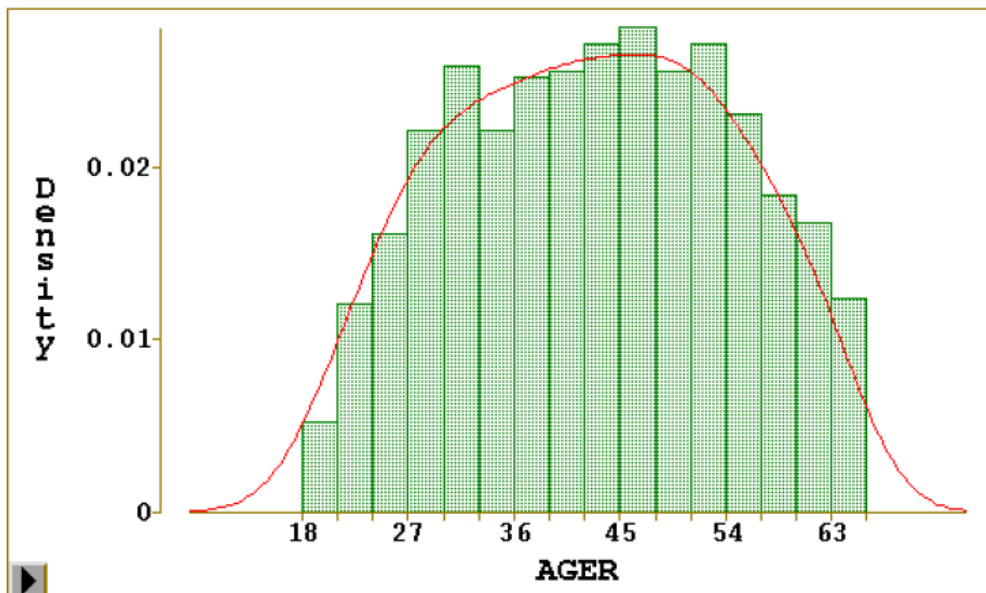


FIG. 2.3 – Histogramme et estimation fonctionnelle par la méthode du noyau de la distribution des âges.

II.3.2. Cas qualitatif

Par définition, les observations d'une variable qualitative ne sont pas des valeurs numériques, mais des caractéristiques, appelées *modalités*. Lorsque ces modalités sont naturellement ordonnées (par exemple, la mention au bac ou une classe d'âge), la variable est dite *ordinaire*. Dans le cas contraire (par exemple, la profession dans une population de personnes actives ou la situation familiale) la variable est dite *nominale*.

Les représentations graphiques que l'on rencontre avec les variables qualitatives sont assez nombreuses. Les trois plus courantes, qui sont aussi les plus appropriées, sont les diagrammes en colonnes, en barre, en secteurs. Tous visent à représenter la répartition en effectif ou fréquences des individus dans les différentes classes ou modalités.

II.4. Liaison entre variables

Dans cette section, on s'intéresse à l'étude simultanée de deux variables X et Y . L'objectif essentiel des méthodes présentées est de mettre en évidence une éventuelle variation simultanée des deux variables, qu'on appellera alors *liaison*. Dans certains cas, cette liaison peut être considérée *à priori* comme *causale*, une variable X expliquant l'autre Y ; dans d'autres, ce n'est pas le cas, et les deux variables jouent des rôles symétriques. Dans la pratique, il conviendra de bien différencier les deux situations et une liaison n'entraîne pas nécessairement une causalité. Sont ainsi introduites les notions de covariance, coefficient de corrélation linéaire, régression linéaire, rapport de corrélation, indice de concentration, khi-deux et autres indicateurs qui lui sont liés. De même, on présente les graphiques illustrant les liaisons entre variables: nuage de points (*scatter-plot*), diagrammes-boîtes parallèles, diagramme de profils, tableau de nuages (*scatter-plot matrix*).

II.4.1 Deux variables quantitatives

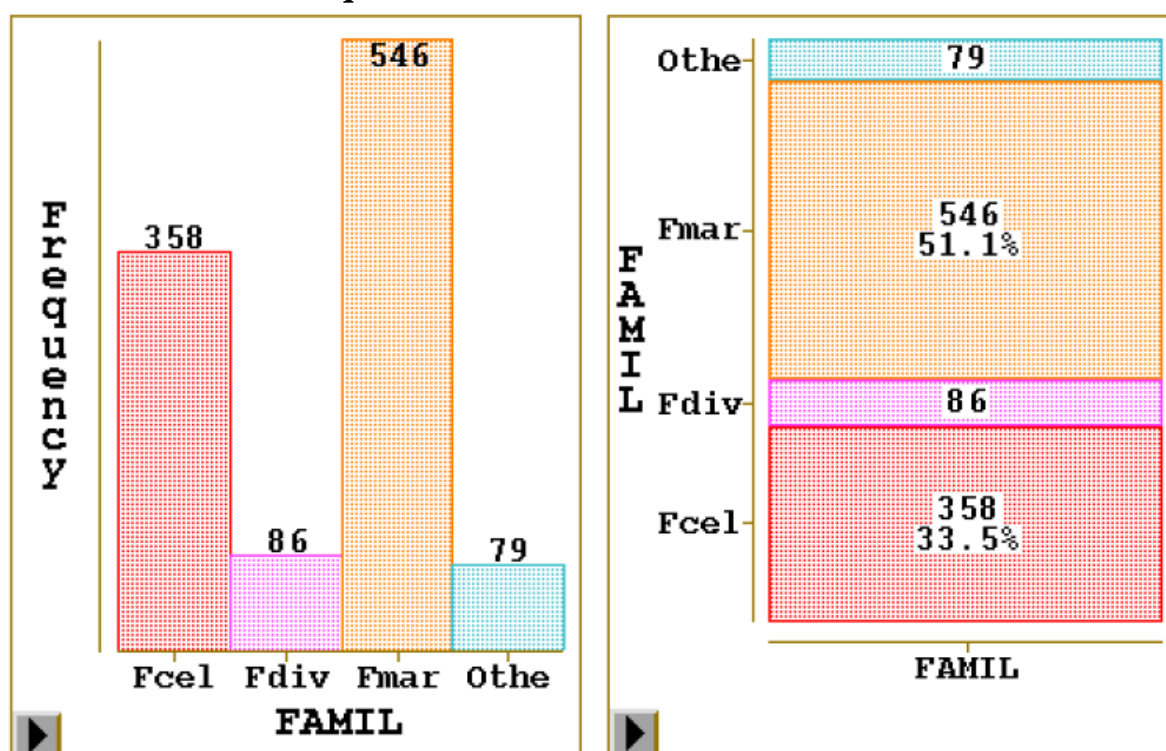


FIG. 2.4 – Diagramme en barres et diagramme en colonne de la répartition des situations familiales. Certaines modalités trop rares et regroupées automatiquement dans la classe *other* devront être recodées.

Nuage de points

Il s'agit d'un graphique très commode pour représenter les observations simultanées de deux variables quantitatives. Il consiste à considérer deux axes perpendiculaires, l'axe horizontal représentant la variable X et l'axe vertical la variable Y , puis à représenter chaque individu observé par les coordonnées des valeurs observées. L'ensemble de ces points donne en général une idée assez bonne de la variation conjointe des deux variables et est appelé *nuage*. On notera qu'on rencontre parfois la terminologie de diagramme de dispersion, traduction plus fidèle de l'anglais *scatter-plot*.

Le choix des échelles à retenir pour réaliser un nuage de points peut s'avérer délicat. D'une façon générale, on distinguera le cas de variables *homogènes* (représentant la même grandeur et exprimées dans la même unité) de celui des variables *hétérogènes*. Dans le premier cas, on choisira la même échelle sur les deux axes (qui seront donc orthonormés); dans le second cas, il est recommandé soit de représenter les variables centrées et réduites sur des axes orthonormés, soit de choisir des échelles telles que ce soit sensiblement ces

variables là que l'on représente (c'est en général cette seconde solution qu'utilisent, de façon automatique, les logiciels statistiques).

Indice de liaison

Le coefficient de corrélation linéaire est un indice rendant compte numériquement de la manière dont les deux variables considérées varient simultanément. Il est défini à partir de la covariance qui généralise à deux variables la notion de variance:

$$\begin{aligned} cov(X, Y) &= \sum_{i=1}^n w_i [x_i - \bar{x}] [y_i - \bar{y}] \\ &= \left[\sum_{i=1}^n w_i x_i y_i \right] - \bar{x} \bar{y} \end{aligned}$$

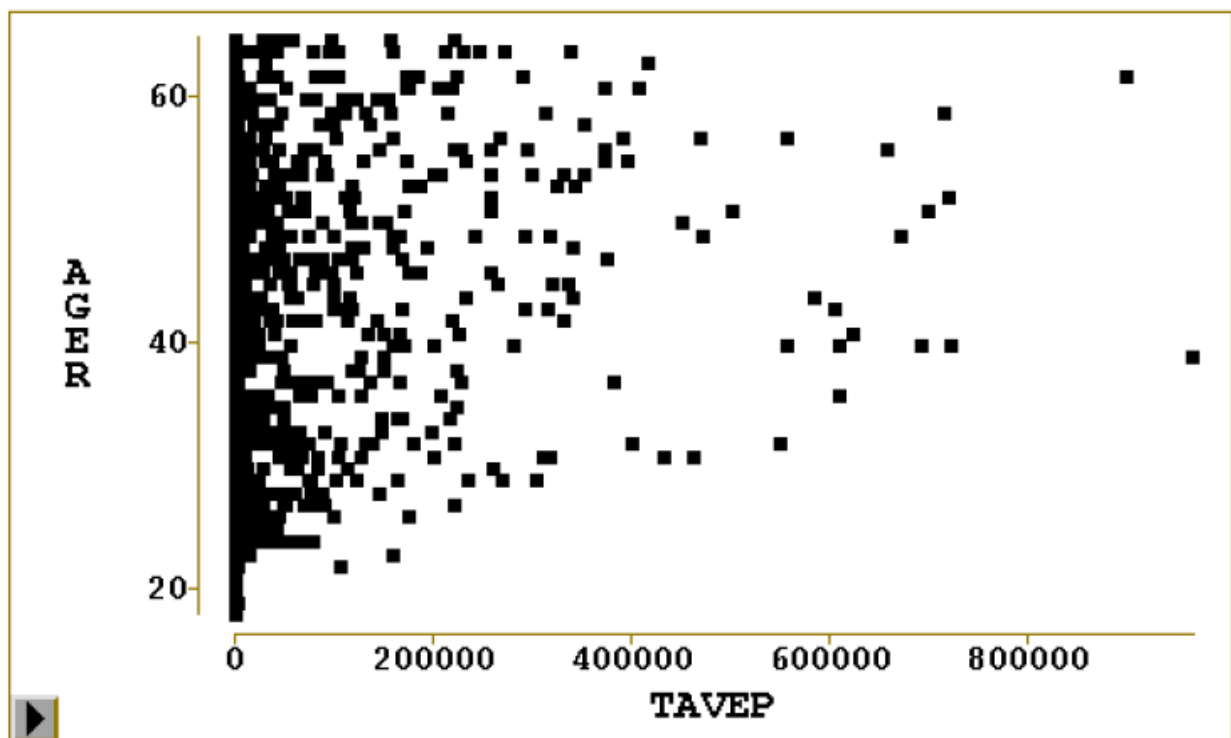


FIG. 2.5 – Nuage de points illustrant l'absence de liaison entre la variable âge et celle cumulant le total des épargnes monétaires (corrélation de 0,17).

La covariance est une forme bilinéaire symétrique qui peut prendre toute valeur réelle et dont la variance est la forme quadratique associée. Elle dépend

des unités de mesure dans lesquelles sont exprimées les variables considérées; en ce sens, ce n'est pas un indice de liaison «intrinsèque». C'est la raison pour laquelle on définit le coefficient de corrélation linéaire (parfois appelé coefficient de Pearson ou de Bravais-Pearson), rapport entre la covariance et le produit des écarts-types:

$$\text{corr}(X, Y) = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y}$$

Le coefficient de corrélation est égal à la covariance des variables centrées et réduites respectivement associées à X et Y : $\text{corr}(X, Y) = \text{cov}\left(\frac{X-\bar{x}}{\sigma_X}, \frac{Y-\bar{y}}{\sigma_Y}\right)$. Par conséquent, $\text{corr}(X, Y)$ est indépendant des unités de mesure de X et de Y . Le coefficient de corrélation est symétrique et prend ses valeurs entre -1 et +1.

Il faut noter que pour mémoire la possibilité d'utiliser d'autres indicateurs de liaison entre variables quantitatives. Construits sur les rangs (corrélation de Spearman) ils sont plus robustes faces aux situations de non linéarité ou des valeurs atypiques mais restent très réducteurs.

II.4.2 Une variable quantitative et une qualitative

Notations

Soit X la variable qualitative considérée, supposée à r modalités notées

$$x_1, \dots, x_\ell, \dots, x_r$$

et soit Y la variable quantitative de moyenne y et de variance σ_Y^2 . En désignant par Ω l'échantillon considéré, chaque modalité x de X définit une sous-population (un sous-ensemble) Ω_ℓ de Ω : c'est l'ensemble des individus, supposés pour simplifier de poids $w_i = \frac{1}{n}$ et sur lesquels on a observé x_ℓ ; on obtient ainsi une partition de Ω en m classes dont on notera n_1, \dots, n_m les cardinaux (avec toujours $\sum_\ell^m n_\ell = n$, où $n = \text{card}(\Omega)$).

Considérant alors la restriction de Y à Ω_ℓ ($\ell = 1, \dots, m$), on peut définir la moyenne et la variance partielles de Y sur cette sous-population; on les notera respectivement \bar{y}_ℓ et σ_ℓ^2 :

$$\bar{y}_\ell = \frac{1}{n_\ell} \sum_{w_i \in \Omega_\ell} Y(w_i)$$

$$\sigma_{\ell}^2 = \frac{1}{n_{\ell}} \sum_{w_i \in \Omega_{\ell}} [Y(w_i) - \bar{y}_{\ell}]^2$$

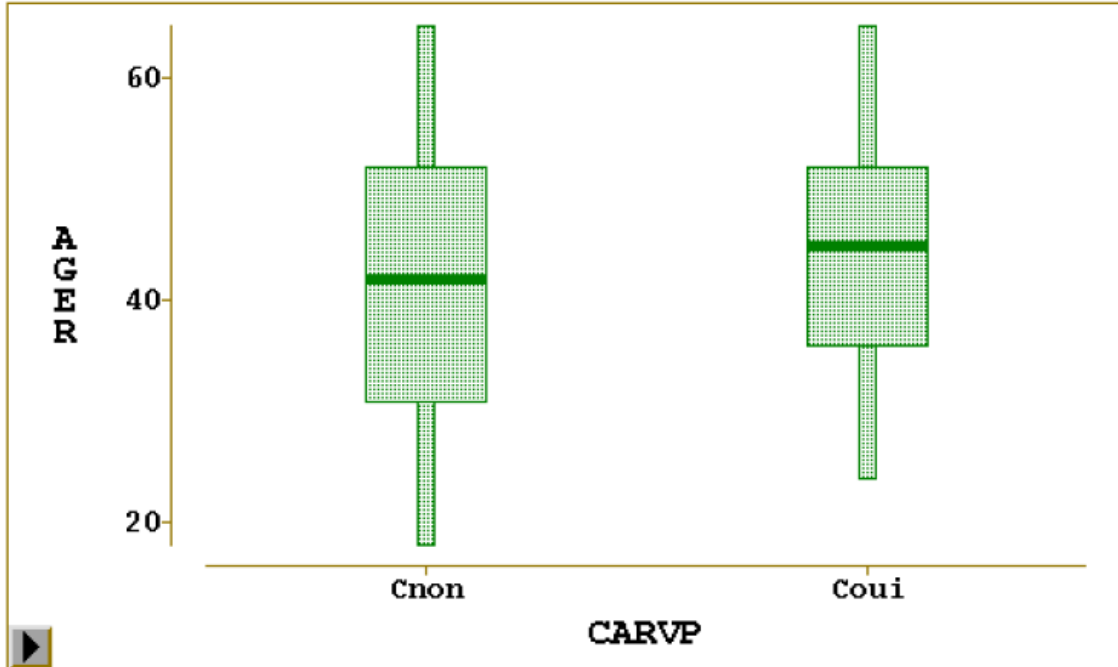


FIG. 2.6 – Diagrammes-boîtes illustrant les différences de distribution des âges en fonction de la possession d’une carte Visa Premier.

Boîtes parallèles

Une façon commode de représenter les données dans le cas de l’étude simultanée d’une variable quantitative et d’une variable qualitative consiste à réaliser des diagrammes-boîtes parallèles; il s’agit, sur un même graphique doté d’une échelle unique, de représenter pour Y un diagramme-boîte pour chacune des sous-populations définies par X . La comparaison de ces boîtes donne une idée assez claire de l’influence de X sur les valeurs de Y , c’est-à-dire de la liaison entre les deux variables.

Formules de décomposition

Ces formules indiquent comment se décomposent la moyenne et la variance de Y sur la partition définie par X (c’est-à-dire comment s’écrivent ces caractéristiques en fonction de leurs valeurs partielles); elles sont nécessaires pour définir un indice de liaison entre les deux variables.

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^r n_{\ell} \bar{y}_{\ell}$$

$$\sigma_Y^2 = \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^r n_{\ell} (\bar{y}_{\ell} - \bar{y})^2 + \frac{1}{n} \sum_{\ell=1}^r n_{\ell} \sigma_{\ell}^2 = \sigma_E^2 + \sigma_R^2$$

Le premier terme de la décomposition de σ_Y^2 , noté σ_E^2 , est appelé *variance expliquée* (par la partition, c'est-à-dire par X) ou *variance inter* (between); le second terme, noté σ_R^2 , est appelé *variance résiduelle* ou *variance intra* (within).

Rapport de corrélation

Il s'agit d'un indice de liaison entre les deux variables X et Y qui est défini par:

$$s_{Y/X} = \sqrt{\frac{\sigma_E^2}{\sigma_Y^2}}$$

X et Y n'étant pas de même nature, $s_{Y/X}$ n'est pas symétrique et vérifie $1 \leq s_{Y/X} \leq 1$. Cet encadrement découle directement de la formule de décomposition de la variance. Les valeurs 0 et 1 ont une signification particulière intéressante.

II.4.3. Deux variables qualitatives

Notations

On considère dans ce paragraphe deux variables qualitatives observées simultanément sur n individus. On suppose que la première, notée X , possède r modalités notées $x_1, \dots, x_{\ell}, \dots, x_r$, et que la seconde, notée Y , possède c modalités notées $y_1, \dots, y_h, \dots, y_c$.

Ces données sont présentées dans un tableau à double entrée, appelé *table de contingence*, dans lequel on dispose les modalités de X en lignes et celles de Y en colonnes. Ce tableau est donc de dimension $r \times c$ et a pour élément générique le nombre $n_{\ell h}$ d'observations conjointes des modalités x_{ℓ} de X et y_h de Y ; les quantités $n_{\ell h}$ sont appelées les *effectifs conjoints*.

Une table de contingence se présente donc sous la forme suivante:

		y_1	...	y_h	...	y_c		sommes
x_1		n_{11}	...	n_{1h}	...	n_{1c}		n_{1+}
.	
.	
.	
x_ℓ		$n_{\ell 1}$...	$n_{\ell h}$...	$n_{\ell c}$		$n_{\ell +}$
.	
.	
.	
x_r		n_{r1}	...	n_{rh}	...	n_{rc}		n_{r+}
sommes		n_{+1}	...	n_{+h}	...	n_{+c}		n

Les quantités $n_{\ell+}$ ($\ell = 1, \dots, r$) et n_{+h} ($h = 1, \dots, c$) sont appelées les *effectifs marginaux* ; ils sont définis par $n_{\ell+} = \sum_{h=1}^c n_{\ell h}$ et $n_{+h} = \sum_{\ell=1}^r n_{\ell h}$, et ils vérifient $\sum_{\ell=1}^r n_{\ell+} = \sum_{h=1}^c n_{+h} = n$. De façon analogue, on peut définir les notions de fréquences conjointes et de fréquences marginales.

Représentations graphiques

On peut envisager, dans le cas de l'étude simultanée de deux variables qualitatives, d'*adapter* les graphiques présentés dans le cas unidimensionnel: on découpe chaque partie (colonne, partie de barre ou secteur) représentant une modalité de l'une des variables selon les effectifs des modalités de l'autre. Mais, de façon générale, il est plus approprié de réaliser des graphiques représentant des quantités très utiles dans ce cas et que l'on appelle les *profils*.

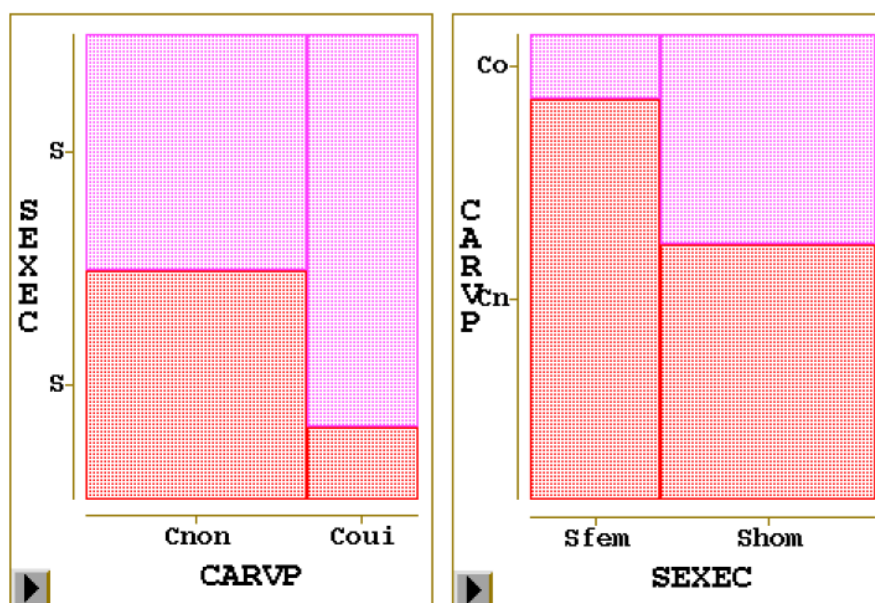


FIG. 2.7 – Diagrammes en barres des profils lignes et colonnes de la table de contingence croisant le sexe et la possession de la carte Visa Premier. La superficie de chaque case est en plus proportionnelle à l'effectif de la cellule associée.

Profils

On appelle ℓ -ème profil-ligne l'ensemble des fréquences de la variable Y conditionnelles à la modalité x_ℓ de X (c'est-à-dire définies au sein de la sous-population Ω_ℓ de Ω associée à cette modalité). Il s'agit donc des quantités:

$$\left\{ \frac{n_{\ell 1}}{n_{\ell +}}, \dots, \frac{n_{\ell h}}{n_{\ell +}}, \dots, \frac{n_{\ell c}}{n_{\ell +}} \right\}$$

On définit de façon analogue le h -ème profil-colonne:

$$\left\{ \frac{n_{1h}}{n_{+h}}, \dots, \frac{n_{\ell h}}{n_{+h}}, \dots, \frac{n_{rh}}{n_{+h}} \right\}$$

La représentation graphique des profils-lignes ou des profils-colonnes, au moyen, par exemple, de diagrammes en barre parallèles, donne alors une idée assez précise de la variation conjointe des deux variables.

Indices de liaison

Lorsque tous les profils-lignes sont égaux, ce qui est équivalent à ce que tous les profils-colonnes soient égaux et que

$$\forall (\ell, h) \in \{1, \dots, r\} \times \{1, \dots, c\}: n_{\ell h} = \frac{n_{\ell} + n + h}{n}$$

on dit qu'il n'existe aucune forme de liaison entre les deux variables considérées X et Y . Par suite, la mesure de la liaison va se faire en évaluant l'écart entre la situation observée et l'état de non liaison défini ci-dessus.

Khi-deux

Il est courant en statistique de comparer une table de contingence observée, d'effectif conjoint générique $n_{\ell h}$, à une table de contingence donnée à priori (et appelée *standard*), d'effectif conjoint générique $s_{\ell h}$, en calculant la quantité

$$\sum_{\ell=1}^r \sum_{h=1}^c \frac{(n_{\ell h} - s_{\ell h})^2}{s_{\ell h}}$$

De façon naturelle, pour mesurer la liaison sur une table de contingence, on utilise donc l'indice appelé khi-deux (chi-square) et défini comme suit:

$$\chi^2 = \sum_{\ell=1}^r \sum_{h=1}^c \frac{\left(n_{\ell h} - \frac{n_{\ell} + n + h}{n}\right)^2}{\frac{n_{\ell} + n + h}{n}} = n \left(\sum_{\ell=1}^r \sum_{h=1}^c \frac{n_{\ell h}^2}{n_{\ell} + n + h} - 1 \right)$$

Le coefficient χ^2 est toujours positif ou nul et il est d'autant plus grand que la liaison entre les deux variables considérées est forte. Malheureusement, il dépend aussi des dimensions r et c de la table étudiée, ainsi que de la taille n de l'échantillon observé; en particulier, il n'est pas majoré. C'est la raison pour laquelle on a défini d'autres indices, liés au khi-deux, et dont l'objectif est de pallier ces défauts.

Autres indicateurs

On en citera trois.

- 1) Le *phi-deux*: $\phi^2 = \frac{\chi^2}{n}$. Il ne dépend ni encore de r et de c .
- 2) Le coefficient T de Tschuprow:

$$T = \sqrt{\frac{\phi^2}{\sqrt{(r-1)(c-1)}}}$$

On peut vérifier que: $0 \leq T \leq 1$.

- 3) Le coefficient C de cramer:

$$C = \sqrt{\frac{\phi^2}{d-1}}$$

avec: $d = \inf(r, c)$. On vérifie maintenant: $0 \leq T \leq C \leq 1$.

Enfin, la p -value d'un test d'indépendance (test du χ^2) est aussi utilisée pour comparer des liaisons entre variables.

II.5. Vers le cas multidimensionnel

L'objectif des prochains chapitres de ce cours est d'exposer les techniques de la statistique descriptive multidimensionnelle. Or, sans connaître ces techniques, il se trouve qu'il est possible de débiter une exploration de données multidimensionnelles en adaptant simplement les méthodes déjà étudiées.

II.5.1. Matrices des covariances et des corrélations

Lorsqu'on a observé simultanément plusieurs variables quantitatives (p variables, $p \geq 3$) sur le même échantillon, il est possible de calculer d'une part les variances de toutes ces variables, d'autre part les $\frac{p(p-1)}{2}$ covariances des variables prises deux à deux. L'ensemble de ces quantités peut alors être disposé dans une matrice carrée ($p \times p$) et symétrique, comportant les variances sur la diagonale et les covariances à l'extérieur de la diagonale; cette matrice, appelée matrice des variances-covariances (ou encore matrice des covariances) sera notée S . Elle sera utilisée par la suite, mais n'a pas d'interprétation concrète. Il faut qu'il soit possible de vérifier que S est semi définie positive.

De la même manière, on peut construire la matrice symétrique $p \times p$, comportant des 1 sur toute la diagonale et, en dehors de la diagonale, les coefficients de corrélation linéaire entre les variables prises deux à deux. Cette matrice est appelée matrice des corrélations, elle est également semi définie positive, et on la notera R . Elle est de lecture commode et indique quelle est la structure de corrélation des variables étudiées.

II.5.2 Tableaux de nuages

On note X^1, \dots, X^p les p variables quantitatives considérées; on appelle tableau de nuages le graphique obtenu en juxtaposant, dans une sorte de matrice carrée $p \times p$, p^2 sous-graphiques; chacun des sous-graphiques diagonaux est relatif à l'une des p variables, et il peut s'agir, par exemple, d'un histogramme; le sous-graphique figurant dans le bloc d'indice $(j, j'), j \neq j'$, est le nuage de points réalisé avec la variable X^j en abscisses et la variable $X^{j'}$ en ordonnées. Dans certains logiciels anglo-saxons, ces graphiques sont appelés *splom* (Scatter PLOt Matrix). Le tableau de nuages, avec la matrice des corrélations, fournit ainsi une vision globale des liaisons entre les variables étudiées.

II.5.3 La matrice des coefficients de Tschuprow (ou de Cramer)

On considère maintenant le cas où l'on étudie simultanément plusieurs variables qualitatives (p variables, $p \geq 3$). La matrice des coefficients de

Tschuprow est la matrice carrée d'ordre p , symétrique, comportant des 1 sur la diagonale et, en dehors de la diagonale, les coefficients de Tschuprow entre les variables prises deux à deux. Il s'agit donc d'une matrice du même type que la matrice des corrélations (elle est d'ailleurs, elle aussi, semi définie positive), et son utilisation pratique est analogue. A noter que l'on peut, de la même façon, utiliser les coefficients de Cramer au lieu des coefficients de Tschuprow.

II.6. Problèmes

Les quelques outils de ce chapitre permettent déjà de se faire une première idée d'un jeu de données mais surtout, en préalable à toute analyse, ils permettent de s'assurer de la fiabilité des données, de repérer des valeurs extrêmes atypiques, éventuellement des erreurs de mesures ou de saisie, des incohérences de codage ou d'unité.

Les erreurs, lorsqu'elles sont décelées, conduisent naturellement et nécessairement à leur correction ou à l'élimination des données douteuses mais d'autres problèmes pouvant apparaître n'ont pas toujours de solutions évidentes.

- Le mitage de l'ensemble des données ou absence de certaines valeurs en fait partie. Faut-il supprimer les individus incriminés ou les variables? Faut-il compléter, par une modélisation et prévision partielles, les valeurs manquantes ? Les solutions dépendent du taux de valeurs manquantes, de leur répartition (sont-elles aléatoires) et du niveau de tolérance des méthodes qui vont être utilisées.
- La présence de valeurs atypiques peut influencer sévèrement des estimations de méthodes peu robustes car basées sur le carré d'une distance. Ces valeurs sont-elles des erreurs? Sinon faut-il les conserver en transformant les variables ou en adoptant des méthodes robustes basées sur des écarts absolus?
- Même sans hypothèse explicite de normalité des distributions, il est préférable d'avoir à faire aux distributions relativement symétriques. Une transformation des variables par une fonction monotone (log, puissance) est hautement recommandée afin d'améliorer la symétrie de leur distribution ou encore pour linéariser (nuage de points) la nature d'une liaison.

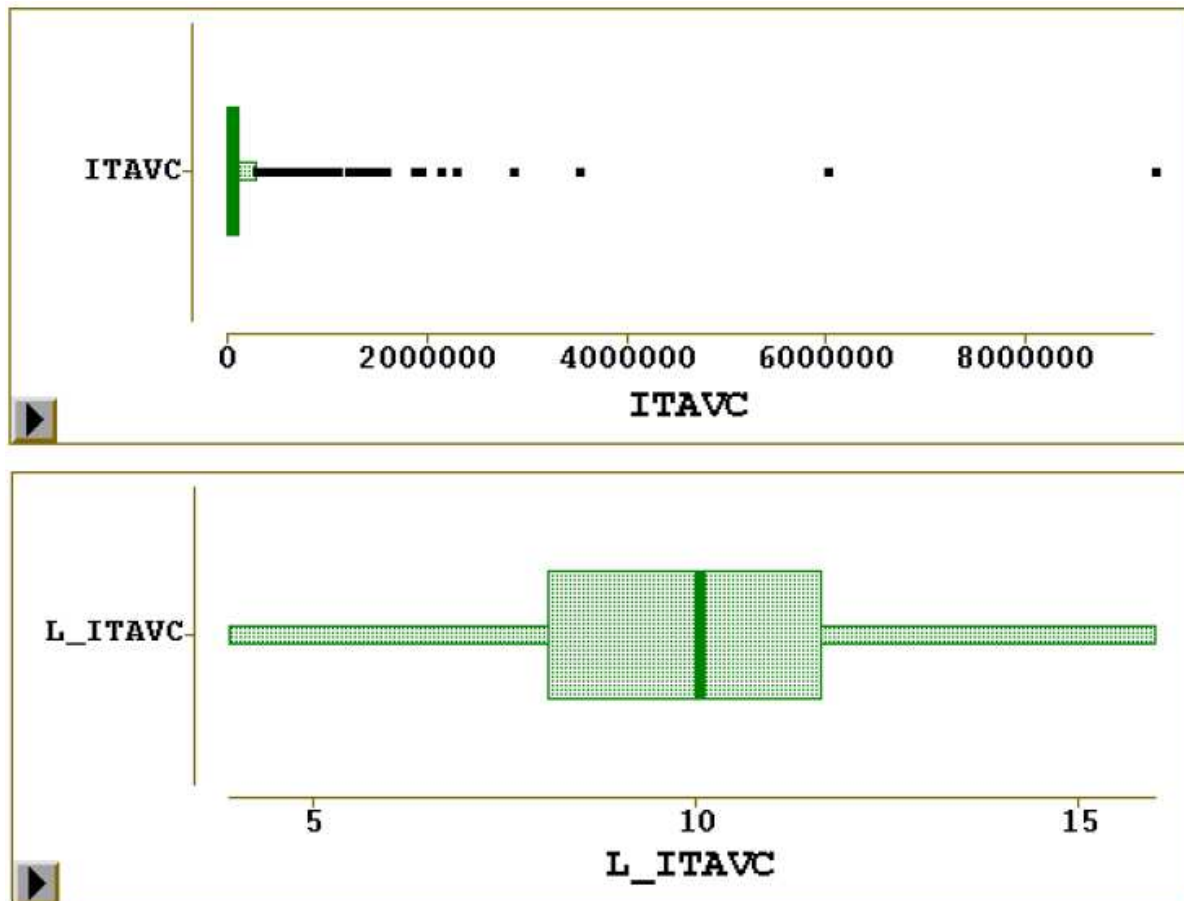


FIG. 2.8 – La simple transformation ($\log(50 + x)$), de la variable cumulant les avoirs, résout bien les problèmes posés par l’allure “log-normale” de sa distribution avec son cortège de valeurs atypiques.

III. ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES

III.1. introduction

Lorsqu’on étudie simultanément un nombre important de variables quantitatives (ne serait-ce que 4!), comment en faire un graphique global ? La difficulté vient de ce que les individus étudiés ne sont plus représentés dans un plan, espace de dimension 2, mais dans un espace de dimension plus importante (par exemple 4). L’objectif de l’Analyse en Composantes Principales (ACP) est de revenir à un espace de dimension réduite (par exemple 2) en déformant le moins possible la réalité. Il s’agit donc d’obtenir le résumé le plus pertinent possible des données initiales.

C’est la matrice des variances-covariances (ou celle des corrélations) qui va permettre de réaliser ce résumé pertinent, parce qu’on analyse

essentiellement la dispersion des données considérées. De cette matrice, on va extraire, par un procédé mathématique adéquat, les facteurs que l'on recherche, en petit nombre. Ils vont permettre de réaliser les graphiques désirés dans cet espace de petite dimension (le nombre de facteurs retenus), en déformant le moins possible la configuration globale des individus selon l'ensemble des variables initiales (ainsi remplacées par les facteurs).

C'est l'interprétation de ces graphiques qui permettra de comprendre la structure des données analysées. Cette interprétation sera guidée par un certain nombre d'indicateurs numériques et graphiques, appelés aides à l'interprétation, qui sont là pour aider l'utilisateur à faire l'interprétation la plus juste et la plus objective possible.

L'analyse en Composantes Principales (ACP) est un grand classique de l'«analyse des données» pour l'étude exploratoire ou la compression d'un grand tableau $n \times p$ de données quantitatives. Le livre de Jolliffe (2002) en détaille tous les aspects et utilisations de façon exhaustive. Elle est introduite ici comme l'estimation des paramètres d'un modèle, afin de préciser la signification statistique des résultats obtenus. L'ACP est illustrée dans ce chapitre à travers l'étude de données élémentaires.

L'ACP joue dans ce cours un rôle central; cette méthode sert de fondement théorique aux autres méthodes de statistique multidimensionnelle dites *factorielles* qui en apparaissent comme des cas particuliers. Cette méthode est donc étudiée en détail et abordée avec différents niveaux de lecture. La première section présente les grands principes de façon très élémentaire, voire intuitive, tandis que les suivantes explicitent les expressions matricielles des résultats.

III.2. Présentation élémentaire de l'ACP

III.2.1 Les données

On considère les notes (de 0 à 20) obtenues par 9 élèves dans 4 disciplines (mathématiques, physique, français, anglais):

	MATH	PHYS	FRANC	ANGL
Jean	6.00	6.00	5.00	5.50
Alan	8.00	8.00	8.00	8.00
Anni	6.00	7.00	11.00	9.50
Moni	14.50	14.50	15.50	15.00
Didi	14.00	14.00	12.00	12.50

Andr	11.00	10.00	5.50	7.00
Pier	5.50	7.00	14.00	11.50
Brig	13.00	12.50	8.50	9.50
Evel	9.00	9.50	12.50	12.00

On sait comment analyser séparément chacune de ces 4 variables, soit en faisant un *graphique*, soit en calculant des *résumés numériques*. On sait également qu'on peut regarder les *liaisons entre 2 variables* (par exemple mathématiques et français), soit en faisant un graphique du type nuage de points, soit en calculant leur coefficient de *corrélacion linéaire*, voire en réalisant la régression de l'une sur l'autre.

Mais comment faire une étude simultanée des 4 variables, ne serait-ce qu'en réalisant un graphique? La difficulté vient de ce que les individus (les élèves) ne sont plus représentés dans un plan, espace de dimension 2, mais dans un espace de dimension 4 (chacun étant caractérisé par les 4 notes qu'il a obtenues). L'objectif de l'Analyse en Composantes Principales est de revenir à un espace de dimension réduite (par exemple, ici, 2) en déformant le moins possible la réalité. Il s'agit donc d'obtenir le *résumé le plus pertinent* des données initiales.

III.2.2. Résultats préliminaires

Tout logiciel fournit la moyenne, l'écart-type, le minimum et le maximum de chaque variable. Il s'agit donc, pour l'instant, d'*études univariées*.

Statistiques élémentaires

Variable	Moyenne	Ecart-type	Minimum	Maximum
MATH	9.67	3.37	5.50	14.50
PHYS	9.83	2.99	6.00	14.50
FRAN	10.22	3.47	5.00	15.50
ANGL	10.06	2.81	5.50	15.00

On note au passage la grande homogénéité des 4 variables considérées: même ordre de grandeur pour les moyennes, les écarts-types, les minima et les maxima.

Le tableau suivant est la *matrice des corrélations*. Elle donne les coefficients de corrélation linéaire des variables prises deux à deux. C'est une succession d'*analyses bivariées*, constituant un premier pas vers l'*analyse multivariée*.

Coefficients de corrélation

	MATH	PHYS	FRANC	ANGL
MATH	1.00	0.98	0.23	0.51
PHYS	0.98	1.00	0.40	0.65
FRANC	0.23	0.40	1.00	0.95
ANGL	0.51	0.65	0.95	1.00

Remarquons que toutes les corrélations linéaires sont positives (ce qui signifie que toutes les variables varient, en moyenne, dans le même sens), certaines étant très fortes (0.98 et 0.95), d'autres moyennes (0.65 et 0.51), d'autres enfin plutôt faibles (0.40 et 0.23).

III.2.3. Résultats généraux

On continue l'analyse par **la matrice des variances-covariances**, matrice de même nature que celle des corrélations, bien que moins "parlante". La diagonale de cette matrice fournit les variances des 4 variables considérées (on notera qu'au niveau des calculs, il est plus commode de manipuler la variance que l'écart-type; pour cette raison, dans de nombreuses méthodes statistiques, comme en A.C.P., on utilise la variance pour prendre en compte la dispersion d'une variable quantitative).

Matrice des variances-covariances

	MATH	PHYS	FRANC	ANGL
MATH	11.39	9.92	2.66	4.82
PHYS	9.92	8.94	4.12	5.48
FRANC	2.66	4.12	12.06	9.29
ANGL	4.82	5.48	9.29	7.91

Les *valeurs propres* données ci-dessous sont celles de la matrice des variances-covariances.

Valeurs propres; variances expliquées

FACTEUR	VAL. PR.	PCT. VAR.	PCT. CUM.
1	28.23	0.70	0.70
2	12.03	0.30	1.00
3	0.03	0.00	1.00
4	0.01	0.00	1.00
Sommes	40.30	1.00	

Interprétation

Chaque ligne du tableau ci-dessus correspond à une variable virtuelle (voilà les facteurs) dont la colonne VAL. PR. (valeur propre) fournit la variance (en fait, chaque valeur propre représente la variance du facteur correspondant). La colonne PCT. VAR, ou pourcentage de variance, correspond au pourcentage de variance de chaque ligne par rapport au total. La colonne PCT. CUM. représente le cumul de ces pourcentages.

On additionne maintenant les variances des 4 variables initiales (diagonale de la matrice des variances-covariances) : $11.39+8.94+12.06+7.91 = 40.30$. La dispersion totale des individus considérés, en dimension 4, est ainsi égale à 40.30.

On additionne par ailleurs les 4 valeurs propres obtenues : $28.23+12.03+0.03+0.01 = 40.30$.

Le nuage de points en dimension 4 est toujours le même et sa dispersion globale n'a pas changé. Il s'agit d'un simple changement de base dans un espace vectoriel. C'est la répartition de cette dispersion, selon les nouvelles variables que sont les facteurs, ou composantes principales, qui se trouve modifiée: les 2 premiers facteurs restituent à eux seuls la quasi-totalité de la dispersion du nuage, ce qui permet de négliger les 2 autres.

Par conséquent, les graphiques en dimension 2 présentés ci-dessous résument presque parfaitement la configuration réelle des données qui se trouvent en dimension 4 : l'objectif (résumé pertinent des données en petite dimension) est donc atteint.

III.2.4. Résultats sur les variables

Le résultat fondamental concernant les variables est le tableau des **corrélations variables facteurs**. Il s'agit des coefficients de corrélation linéaire entre les variables initiales et les facteurs. Ce sont ces corrélations qui vont permettre de donner un sens aux facteurs (de les interpréter).

Corrélations variables-facteurs

FACTEURS -->	F1	F2	F3	F4
MATH	0.81	-0.58	0.01	-0.02
PHYS	0.90	-0.43	-0.03	0.02
FRANC	0.75	0.66	-0.02	-0.01
ANGL	0.91	0.40	0.05	0.01

Les deux premières colonnes de ce tableau permettent, tout d'abord, de réaliser le graphique des variables.

Mais, ces deux colonnes permettent également de donner une signification aux facteurs (donc aux axes des graphiques).

On notera que les deux dernières colonnes ne seront pas utilisées puisqu'on ne retient que deux dimensions pour interpréter l'analyse.

Interprétation

Ainsi, on voit que le premier facteur est corrélé positivement, et assez fortement, avec chacune des 4 variables initiales: plus un élève obtient de bonnes notes dans chacune des 4 disciplines, plus il a un score élevé sur l'axe 1; réciproquement, plus ses notes sont mauvaises, plus son score est négatif. En ce qui concerne l'axe 2, il oppose, d'une part, le français et l'anglais (corrélations positives), d'autre part, les mathématiques et la physique (corrélations négatives). Il s'agit donc d'un axe d'opposition entre disciplines littéraires et disciplines scientifiques, surtout marqué par l'opposition entre le français et les mathématiques. Cette interprétation peut être précisée avec les graphiques et tableaux relatifs aux individus qu'on présente maintenant.

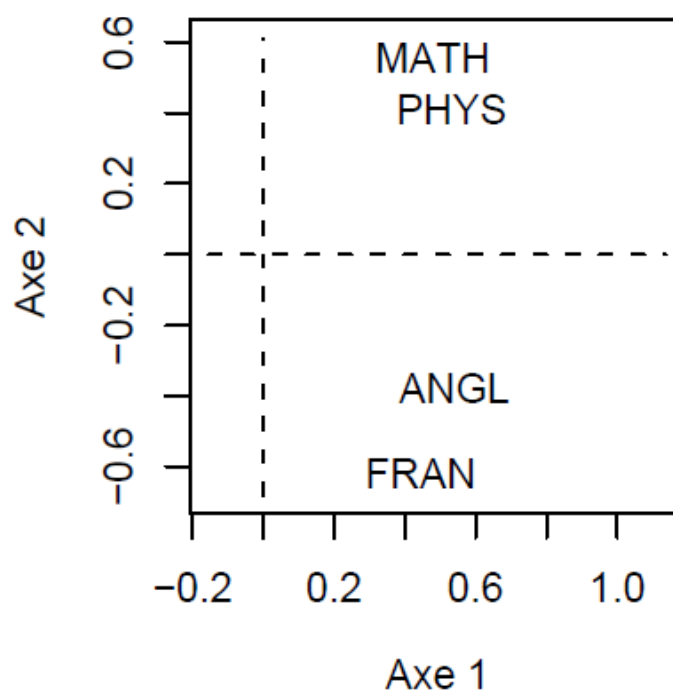


FIG. 3.1 – Représentation des variables

III.2.5 Résultats sur les individus

Le tableau ci-dessous contient tous les résultats importants sur les individus.

Coordonnées des individus ; contributions ; cosinus carrés

	POIDS	FACT1	FACT2	CONTG	CONT1	CONT2	COSCA1	COSCA2
Jean	0.11	-8.61	-1.41	20.99	29.19	1.83	0.97	0.03
Alan	0.11	-3.88	-0.50	4.22	5.92	0.23	0.98	0.02
Anni	0.11	-3.21	3.47	6.17	4.06	11.11	0.46	0.54
Moni	0.11	9.85	0.60	26.86	38.19	0.33	1.00	0.00
Didi	0.11	6.41	-2.05	12.48	16.15	3.87	0.91	0.09
Andr	0.11	-3.03	-4.92	9.22	3.62	22.37	0.28	0.72
Pier	0.11	-1.03	6.38	11.51	0.41	37.56	0.03	0.97
Brig	0.11	1.95	-4.20	5.93	1.50	16.29	0.18	0.82
Evel	0.11	1.55	2.63	2.63	0.95	6.41	0.25	0.73

On notera que chaque individu représente 1 élément sur 9, d'où un poids (une pondération) de $1/9 = 0.11$, ce qui est fourni par la première colonne du tableau ci-dessus.

Les 2 colonnes suivantes fournissent les coordonnées des individus (les élèves) sur les deux premiers axes (les facteurs) et ont donc permis de réaliser le **graphique des individus**. Ce dernier permet de préciser la signification des axes, donc des facteurs.

Interprétation

On peut ainsi voir que l'axe 1 représente le résultat d'ensemble des élèves (si on prend leur score – ou coordonnée – sur l'axe 1, on obtient le même classement que si on prend leur moyenne générale). Par ailleurs, l'élève "le plus haut" sur le graphique, celui qui a la coordonnée la plus élevée sur l'axe 2, est Pierre dont les résultats sont les plus contrastés en faveur des disciplines littéraires (14 et 11.5 contre 7 et 5.5). C'est exactement le contraire pour André qui obtient la moyenne dans les disciplines scientifiques (11 et 10) mais des résultats très faibles dans les disciplines littéraires (7 et 5.5). On notera que Monique et Alain ont un score voisin de 0 sur l'axe 2 car ils ont des résultats très homogènes dans les 4 disciplines (mais à des niveaux très distincts, ce qu'a déjà révélé l'axe 1).

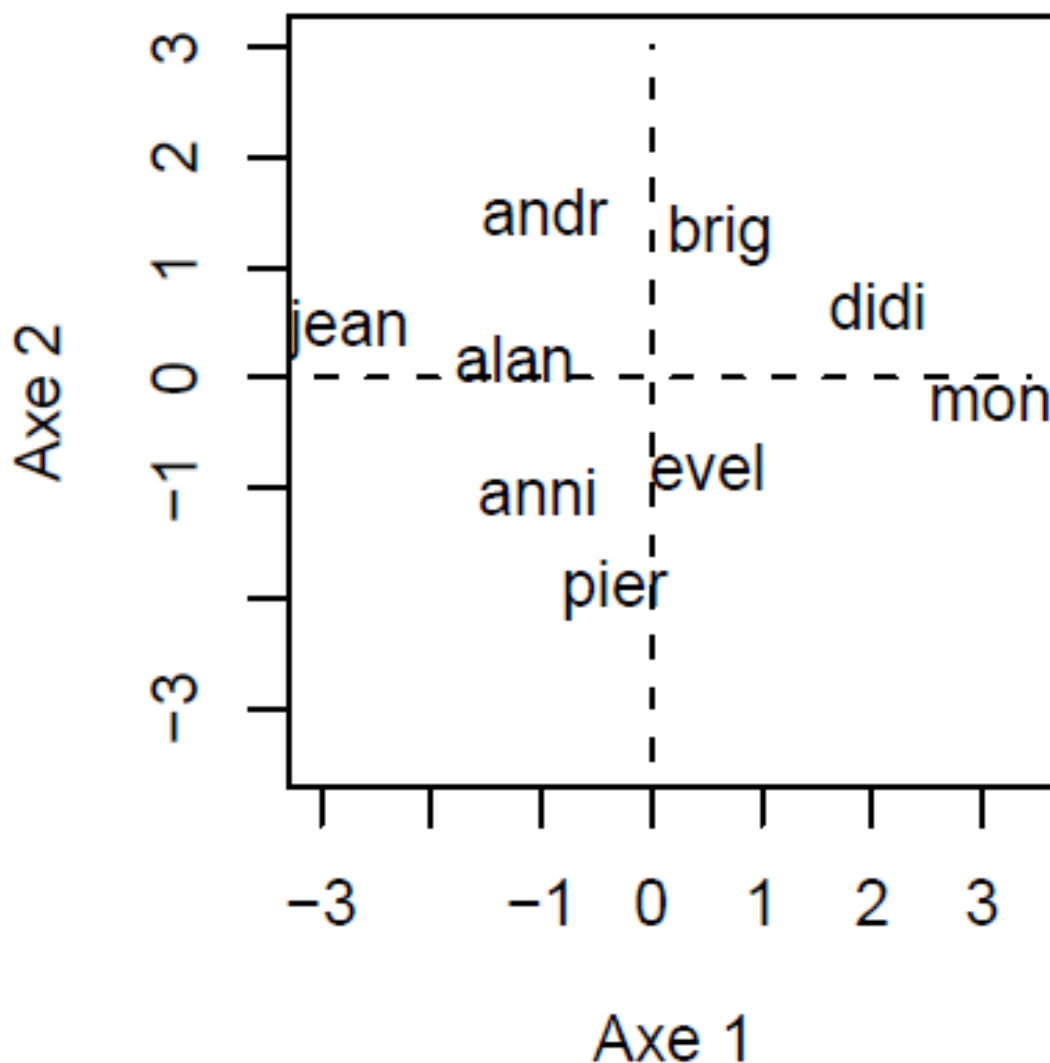


FIG. 3.2 – Données fictives : Représentation des individus

Les 3 colonnes suivantes du tableau fournissent des **contributions** des individus à diverses dispersions: CONT1 et CONT2 donnent les contributions des individus à la variance selon les axes 1 et 2 (on rappelle que c'est la variance qui caractérise la dispersion); CONTG les contributions à la dispersion en dimension 4 (il s'agit de ce que l'on appelle l'**inertie** du nuage des élèves ; la notion d'inertie généralise celle de variance en dimension quelconque, la variance étant toujours relative à une seule variable). Ces contributions sont fournies en pourcentages (chaque colonne somme à 100) et permettent de repérer les individus les plus importants au niveau de chaque axe (ou du nuage en dimension 4). Elles servent en général à affiner l'interprétation des résultats de l'analyse.

Ainsi, par exemple, la variance de l'axe 1 vaut 28.23 (première valeur propre). On peut la retrouver en utilisant la formule de définition de la variance:

$$Var(C^1) = \frac{1}{9} \sum_{i=1}^9 (c_i^1)^2$$

(il faut noter que, dans une A.C.P., les variables étant centrées, il en va de même pour les facteurs; ainsi, la moyenne de C^1 est nulle et n'apparaît pas dans la formule de la variance). La coordonnée de Jean (le premier individu du fichier) sur l'axe 1 vaut $c_1^1 = -8.61$; sa contribution est donc:

$$\frac{\frac{1}{9}(-8.61)^2}{28.23} \times 100 = 29.19\%$$

A lui seul, cet individu représente près de 30% de la variance: il est prépondérant (au même titre que Monique) dans la définition de l'axe 1; cela provient du fait qu'il a le résultat le plus faible, Monique ayant, à l'opposé, le résultat le meilleur.

Enfin, les 2 dernières colonnes du tableau sont des cosinus carrés qui fournissent la (* qualité de la représentation *) de chaque individu sur chaque axe. Ces quantités s'additionnent axe par axe, de sorte que, en dimension 2, Evelyne est représentée à 98 % (0.25 + 0.73), tandis que les 8 autres individus le sont à 100 %.

Lorsqu'on considère les données initiales, chaque individu (chaque élève) est représenté par un vecteur dans un espace de dimension 4 (les éléments – ou coordonnées – de ce vecteur sont les notes obtenues dans les 4 disciplines). Lorsqu'on résume les données en dimension 2, et donc qu'on les représenté dans un plan, chaque individu est alors représenté par la projection du vecteur initial sur le plan en question. Le cosinus carré relativement aux deux premières dimensions (par exemple, pour Evelyne, 0.98 ou 98 %) est celui de l'angle formé par le vecteur initial et sa projection dans le plan. Plus le vecteur initial est proche du plan, plus l'angle en question est petit et plus le cosinus, et son carré, sont proches de 1 (ou de 100 %): la représentation est alors très bonne. Au contraire, plus le vecteur initial est loin du plan, plus l'angle en question est grand (proche de 90 degrés) et plus le cosinus, et son carré, sont proches de 0 (ou de 0 %): la représentation est alors très mauvaise. On utilise les carrés des cosinus, parce qu'ils s'additionnent suivant les différentes dimensions.

III.3. Représentation vectorielle des données quantitatives

III.3.1. Notations

Soit p variables statistiques réelles $X^j (j = 1, \dots, p)$ observées sur n individus $i (i = 1, \dots, n)$ affectés des poids w_i :

$$\forall i = 1, \dots, n: w_i > 0 \text{ et } \sum_{i=1}^m w_i = 1$$

$$\forall i = 1, \dots, n: x_i^j = X^j(i), \text{ mesure de } X^j \text{ sur le } i^{\text{ème}} \text{ individu.}$$

Ces mesures sont regroupées dans une matrice \mathbf{X} d'ordre $(n \times p)$.

	X^1	...	X^j	...	X^p
1	x_1^1	...	x_1^j	...	x_1^p
.	.		.		.
.	.		.		.
.	.		.		.
i	x_i^1	...	x_i^j	...	x_i^p
.	.		.		.
.	.		.		.
.	.		.		.
n	x_n^1	...	x_n^j	...	x_n^p

- A chaque individu i est associé le vecteur x_i contenant la i -ème ligne de \mathbf{X} mise en colonne. C'est un élément d'un espace vectoriel noté E de dimension p ; on choisit \mathbb{R}^p muni de la base canonique \mathcal{E} et d'une métrique de matrice \mathbf{M} lui conférant une structure d'espace euclidien: E est isomorphe à $(\mathbb{R}^p, \mathcal{E}, \mathbf{M})$; E est alors appelé *espace des individus*.
- A chaque variable X^j est associé le vecteur x^j contenant la j -ème colonne *centrée* (la moyenne de la colonne est retranchée à toute la colonne) de \mathbf{X} . C'est un élément d'un espace vectoriel noté F de dimension n ; on choisit \mathbb{R}^n muni de la base canonique \mathcal{F} et d'une métrique de matrice \mathbf{D} diagonale des poids lui conférant une structure d'espace euclidien: F est isomorphe à $(\mathbb{R}^n, \mathcal{F}, \mathbf{D})$ avec $\mathbf{D} = \text{diag}(w_1, \dots, w_n)$; F est alors appelé *espace des variables*.

III.3.2 Interprétation statistique de la métrique des poids

L'utilisation de la métrique des poids dans l'espace des variables \mathcal{F} donne un sens très particulier aux notions usuelles définies sur les espaces euclidiens. Ce paragraphe est la clé permettant de fournir les interprétations en termes statistiques des propriétés et résultats mathématiques.

Moyenne empirique de X^j :	\bar{x}^j	$= \langle X e^j, \mathbf{1}_n \rangle_D = e^{j'} X' D \mathbf{1}_n$
Barycentre des individus :	\bar{x}	$= X' D \mathbf{1}_n$
Matrice des données centrées:	\bar{X}	$= X - \mathbf{1}_n \bar{x}'$
Ecart-type de X^j :	σ_j	$= (x^{j'} D x^j)^{\frac{1}{2}} = \ x^j\ _D$
Covariance de X^j et X^k :	$x^{j'} D x^k$	$= \langle x^j, x^k \rangle_D$
Matrice des covariances:	S	$= \sum_{i=1}^n w_i (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})' = \bar{X}' D \bar{X}$
Corrélation de X^j et X^k :	$\frac{\langle x^j, x^k \rangle_D}{\ x^j\ _D \ x^k\ _D}$	$= \cos \theta_D(x^j, x^k)$

Attention : Par souci de simplicité des notations, on désigne toujours par x^j les colonnes de la matrice **centrée** \bar{X} . On considère donc que des vecteurs “variables” sont toujours centrés.

Ainsi, lorsque les variables sont centrées et représentées par des vecteurs de F :

- la *longueur* d'un vecteur représente un *écart-type*;
- le *cosinus* d'un angle entre deux vecteurs représente une *corrélation*.

III.3.3. La méthode

Les objectifs poursuivis par une ACP sont:

- la représentation graphique “optimale” des individus (lignes), minimisant les déformations du nuage des points, dans un sous-espace E_q de dimension $q (q < p)$;
- la représentation graphique des variables dans un sous-espace F_q en explicitant au “mieux” les liaisons initiales entre ces variables;
- la réduction de la dimension (compression), ou approximation de X par un tableau de rang $q (q < p)$.

Les derniers objectifs permettent d'utiliser l'ACP comme préalable à une autre technique préférant des variables orthogonales (régression linéaire) ou un nombre réduit d'entrées (réseaux neuronaux).

Des arguments de type géométrique dans la littérature francophone, ou bien de type statistique avec hypothèses de normalité dans la littérature anglo-saxonne, justifient la définition de l'ACP. On adopte ici une optique intermédiaire en se référant à un modelé "allégé" car ne nécessitant pas d'hypothèse "forte" sur la distribution des observations (normalité). Plus précisément, l'ACP admet des définitions équivalentes selon que l'on s'attache à la représentation des individus, à celle des variables ou encore à leur représentation simultanée.

III.4. Modèle

Les notations sont celles du paragraphe précédent:

- X désigne le tableau des données issues de l'observation de p variables quantitatives X^j sur n individus i de poids w_i ;
- E est l'espace des individus muni de la base canonique et de la métrique de matrice M ;
- F est l'espace des variables muni de la base canonique et de la métrique des poids $D = \text{diag}(w_1, \dots, w_n)$.

De façon générale, un modèle s'écrit:

$$\textbf{Observation} = \textbf{modèle} + \textbf{Bruit}$$

assorti de différents types d'hypothèses et de contraintes sur le modèle et sur le bruit.

En ACP, la matrice des données est supposée être issue de l'observation de n vecteurs aléatoires indépendants $\{x_1, \dots, x_n\}$, de même matrice de covariance $\sigma^2 \Gamma$, mais d'espérances différentes z_i , toutes contenues dans un sous-espace affine de dimension $q (q < p)$ de E . Dans ce modèle, $E(x_i) = z_i$ est un paramètre spécifique attaché à chaque individu i et appelé *effet fixe*, le modèle étant dit *fonctionnel*. Ceci s'écrit en résumé:

$\{x_i; i = 1, \dots, n\}$, n vecteurs aléatoires indépendants de E ,

$$x_i = z_i + \epsilon_i, i = 1, \dots, n \text{ avec } \begin{cases} E(\epsilon_i) = 0, \text{var}(\epsilon_i) = \sigma^2 \Gamma, \\ \sigma > 0 \text{ inconnu}, \Gamma \text{ régulière et connue,} \\ \exists A_q, \text{sous-espace affine de dimension } q \text{ de } E \text{ tel que } \forall i, z_i \in A_q (q < p) \end{cases} \quad (3.1)$$

Soit $z = \sum_{i=1}^n w_i z_i$. Les hypothèses du modèle entraînent que z appartient à A_q . Soit donc E_q le sous-espace vectoriel de E de dimension q tel que:

$$A_q = \bar{z} + E_q$$

Les paramètres à estimer sont alors E_q et $z_i, i = 1, \dots, n$, éventuellement; z_i est la part systématique, ou *effet*, supposée de rang q ; éliminer le bruit revient donc à réduire la dimension.

Si les z_i sont considérés comme *aléatoires*, le modèle est alors dit *structurel*; on suppose que $\{x_1, \dots, x_n\}$ est un échantillon statistique. Les unités statistiques jouent des rôles symétriques, elles n'intéressent que pour l'étude des relations entre les variables. On retrouve alors le principe de l'analyse en facteurs (ou en facteurs communs et spécifiques, ou *factor analysis*).

4.1. Estimation

PROPOSITION 3.1. — L'estimation des paramètres de (3.1) est fournie par l'ACP de (X, M, D) c'est-à-dire par la décomposition en valeurs singulières de (\bar{X}, M, D) :

$$\widehat{Z}_q = \sum_{k=1}^q \lambda_k^{1/2} u^k v^{k'} = U_q \Lambda^{1/2} V_q'$$

Preuve

Sans hypothèse sur la distribution de l'erreur, une estimation par les moindres carrés conduit à résoudre le problème:

$$\min_{E_q, z_i} \left\{ \sum_{i=1}^n w_i \|x_i - z_i\|_M^2; \dim(E_q) = q; z_i - \bar{z} \in E_q \right\} \quad (3.2)$$

Soit $\bar{X} = X - 1_n \bar{x}'$ la matrice centrée et Z la matrice $(n \times p)$ dont les lignes sont les vecteurs $(z_i - \bar{z})'$.

$$\sum_{i=1}^n w_i \|x_i - z_i\|_M^2 = \sum_{i=1}^n w_i \|x_i - \bar{x} + \bar{z} - z_i\|_M^2 + \|\bar{x} - \bar{z}\|_M^2$$

Le problème (3.2) conduit alors à prendre $\hat{\bar{z}} = \bar{x}$ et devient équivalent à résoudre:

$$\min_Z \{ \|\bar{X} - Z\|_{M,D}; Z \in M_{n,p}, \text{rang}(Z) = q \} \quad (3.3)$$

La fin de la preuve est une conséquence immédiate du théorème (A.5).

- Les u^k sont les vecteurs propres D -orthonormés de la matrice $\bar{X}M\bar{X}'D$ associés aux valeurs propres λ_k rangées par ordre décroissant.
- Les v_k , appelés *vecteurs principaux*, sont les vecteurs propres M -orthonormés de la matrice $\bar{X}'D\bar{X}M = SM$ associés aux mêmes valeurs propres; ils engendrent des sous espaces vectoriels de dimension 1 appelés axes principaux.

Les estimations sont donc données par:

$$\hat{\bar{z}} = \bar{x}$$

$$\widehat{Z}_q = \sum_{k=1}^q \lambda_k^{1/2} u^k v^{k'} = U_q \Lambda^{1/2} V_q' = \bar{X} \widehat{P}_q'$$

où $\widehat{P}_q = V_q V_q' M$ est la matrice de projection

M -orthogonale sur \widehat{E}_q ,

$$\widehat{E}_q = \text{vect}\{v^1, \dots, v^q\},$$

\widehat{E}_2 est appelé plan principal,

$$\hat{z}_i = \widehat{P}_q x_i + \bar{x}$$

Remarques:

- Les solutions sont emboîtées pour $q = 1, \dots, p$:
 $E_1 = \text{vect}\{v^1\} \subset E_2 = \text{vect}\{v^1, v^2\} \subset E_3 = \text{vect}\{v^1, v^2, v^3\} \subset \dots$
- Les espaces principaux sont uniques sauf, éventuellement, dans le cas de valeurs propres multiples.
- Si les variables ne sont pas homogènes (unités de mesure différentes, variances disparates), elles sont préalablement réduites:

$\tilde{X} = \bar{X}\Sigma^{-1/2}$ où $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_p^2)$, avec $\sigma_j^2 = \text{Var}(X^j)$;
 \tilde{S} est alors la matrice $R = \Sigma^{-1/2}S\Sigma^{-1/2}$ des corrélations.

Sous l'hypothèse que la distribution de l'erreur est gaussienne, une estimation par maximum de vraisemblance conduit à la même solution.

III.4.2 Définition équivalente

On considère p variables statistiques centrées X^1, \dots, X^p . Une combinaison linéaire de coefficients f_j de ces variables,

$$c = \sum_{j=1}^p f_j x^j = \bar{X}f$$

définit une nouvelle variable centrée C qui, à tout individu i , associe la “mesure”

$$C(i) = (x_i - \bar{x})'f$$

PROPOSITION 3.2. — Soient p variables quantitatives centrées X^1, \dots, X^p observées sur n individus de poids w_i ; l'ACP de $(\bar{X}, \mathbf{M}, \mathbf{D})$ est aussi la recherche des q combinaisons linéaires normées des X^j , non corrélées et dont la somme des variances soit maximale.

- Les vecteurs $f^k = Mv^k$ sont les facteurs principaux. Ils permettent de définir les combinaisons linéaires des X^j optimales au sens ci-dessus.
- Les vecteurs $c^k = \bar{X}f^k$ sont les composantes principales.
- Les variables C^k associés sont centrées, non corrélées et de variance λ_k ; ce sont les *variables principales*;

$$\begin{aligned} \text{cov}(C^k, C^\ell) &= (\bar{X}f^k)'D\bar{X}f^\ell = f^{k'}Sf^\ell \\ &= v^{k'}MSMv^\ell = \lambda_\ell v^{k'}Mv^\ell = \lambda_\ell \delta_k^\ell \end{aligned}$$

- Les f^k sont les vecteurs propres M^{-1} -orthonormés de la matrice MS .
- La matrice

$$C = \bar{X}F = \bar{X}MV = U\Lambda^{1/2}$$

est la matrice des composantes principales.

- AA Les axes définis par les vecteurs D -orthonormés u^k sont appelés *axes factoriels*.

III.5. Représentations graphiques

III.5.1. Les individus

Les graphiques obtenus permettent de représenter “au mieux” les distances euclidiennes interindividus mesurées par la métrique M .

Projection

Chaque individu i représenté par x_i est approché par sa projection M -orthogonale \widehat{z}_i^q sur le sous-espace \widehat{E}_q engendré par les q premiers vecteurs principaux $\{v^1, \dots, v^q\}$. En notant e_i un vecteur de la base canonique de E , la coordonnée de l'individu i sur v^k est donnée par:

$$\langle x_i - \bar{x}, v^k \rangle_M = (x_i - \bar{x})' M v^k = e_i' \bar{X} M v^k = c_i^k$$

PROPOSITION 3.3. — Les coordonnées de la projection M -orthogonale de $x_i - \bar{x}$ sur E_q sont les q premiers éléments de la i -ème ligne de la matrice C des composantes principales.

Mesures de “qualité”

La “qualité globale” des représentations est mesurée par la part de *dispersion expliquée*:

$$r_q = \frac{\text{tr} SM \widehat{P}_q}{\text{tr} SM} = \frac{\sum_{k=1}^q \lambda_k}{\sum_{k=1}^p \lambda_k}$$

Remarque — La dispersion d'un nuage de points unidimensionnel par rapport à sa moyenne se mesure par la variance. Dans le cas multidimensionnel, la dispersion du nuage \mathcal{N} par rapport à son barycentre \bar{x} se mesure par l'*inertie*, généralisation de la variance:

$$I_g(\mathcal{N}) = \sum_{i=1}^n w_i \|x_i - \bar{x}\|_M^2 = \|\bar{X}\|_{M,D}^2 = \text{tr}(\bar{X}' D \bar{X} M) = \text{tr}(SM)$$

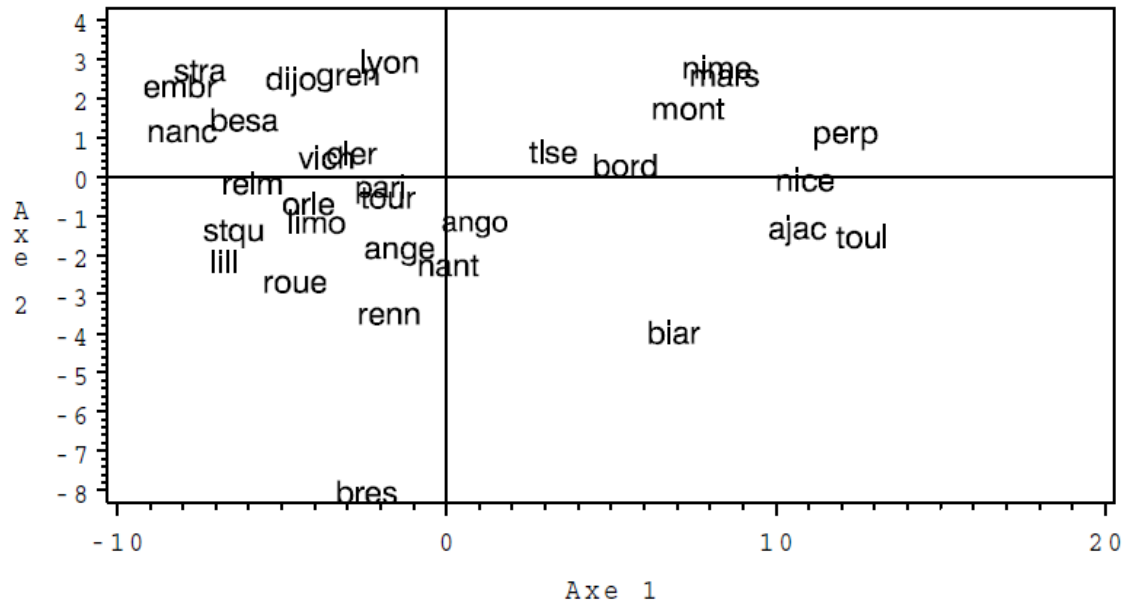


FIG. 3.3 – Températures : premier plan des individus.

La qualité de la représentation de chaque x_i est donnée par le cosinus carré de l'angle qu'il forme avec sa projection:

$$[\cos\theta(x_i - \bar{x}, \hat{z}_i^q)]^2 = \frac{\|\hat{P}_q(x_i - \bar{x})\|_M^2}{\|x_i - \bar{x}\|_M^2} = \frac{\sum_{k=1}^q (c_i^k)^2}{\sum_{k=1}^p (c_i^k)^2}$$

Pour éviter de consulter un tableau qui risque d'être volumineux (n lignes), les étiquettes de chaque individu sont affichées sur les graphiques avec des caractères dont la *taille est fonction de la qualité*. Un individu très mal représenté est à la limite de la lisibilité.

Contributions

Les contributions de chaque individu à l'inertie de leur nuage

$$\gamma_i = \frac{w_i \|x_i - \bar{x}\|_M^2}{trSM} = \frac{w_i \sum_{k=1}^p (c_i^k)^2}{\sum_{k=1}^p \lambda_k}$$

ainsi qu'à la variance d'une variable principale

$$\gamma_i^k = \frac{w_i (c_i^k)^2}{\lambda_k}$$

permettent de déceler les observations les plus *influentes* et, éventuellement, aberrantes. Ces points apparaissent visiblement lors du tracé des diagrammes-

boîtes parallèles des composantes principales qui évitent ainsi une lecture fastidieuse de ce tableau des contributions. En effet, ils se singularisent aussi comme “outliers” hors de la boîte (au-delà des moustaches) correspondant à une direction principale. Les individus correspondants, considérés comme *individus supplémentaires*, peuvent être éliminés lors d’une nouvelle analyse.

Individus supplémentaires

Il s’agit de représenter, par rapport aux axes principaux d’une analyse, des individus qui n’ont pas participé aux calculs de ces axes. Soit s un tel vecteur, il doit être centré, éventuellement réduit,

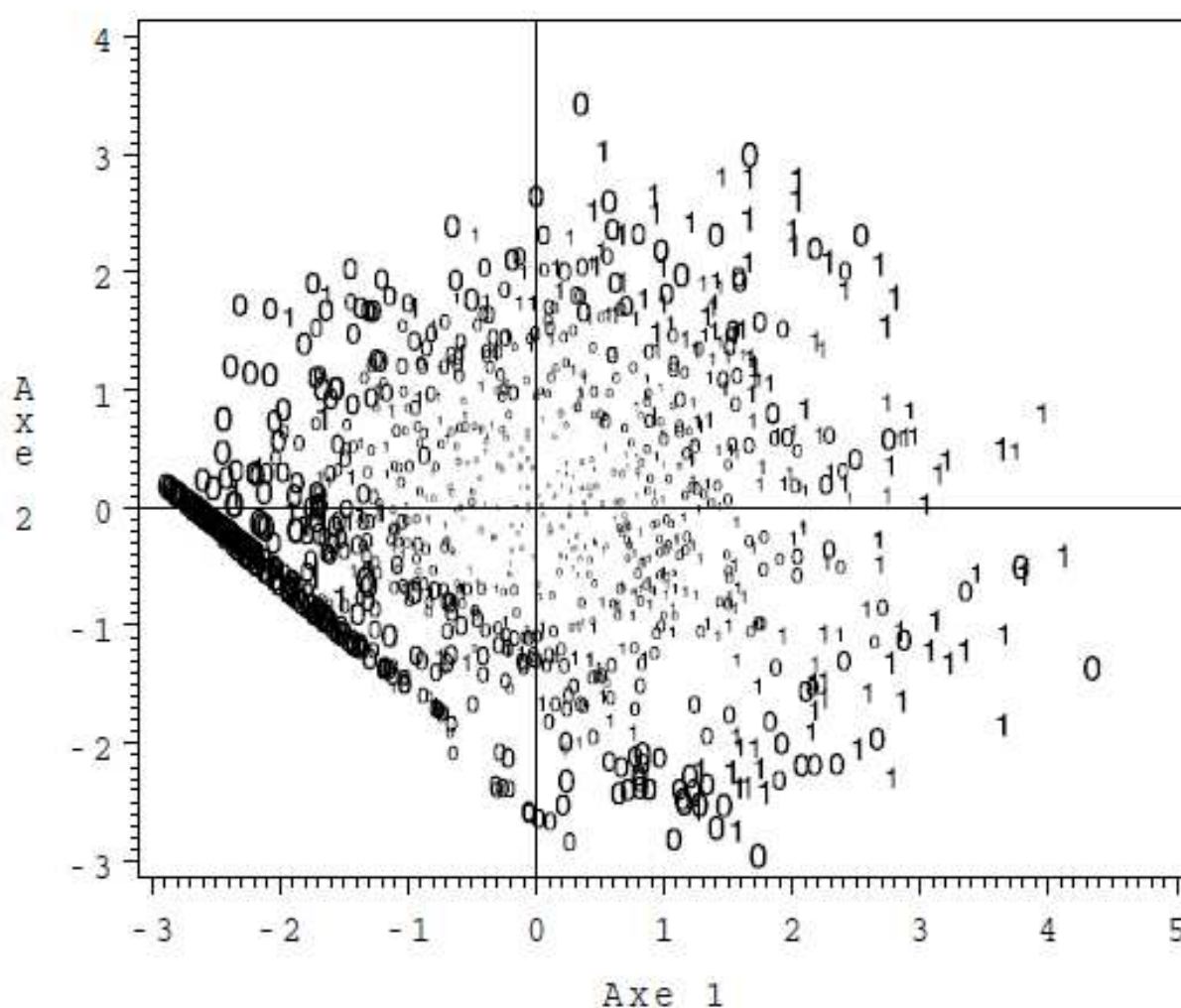


FIG. 3.4 – Carte Visa : premier plan de l’ACP d’une sélection des variables. La discrimination des individus possédant (1) ou non (0) la carte Visa premier n’est pas très claire sur cette représentation.

puis projeté sur le sous-espace de représentation. Les coordonnées sont fournies par:

$$\langle v^k, V_q V_q' M(s - \bar{x}) \rangle_M = v^{k'} M V_q V_q' M(s - \bar{x}) = v^{k'} V_q' M(s - \bar{x})$$

Les coordonnées d'un individu supplémentaire dans la base des vecteurs principaux sont donc:

$$V_q' M(s - \bar{x})$$

III.5.2. Les variables

Les graphiques obtenus permettent de représenter “au mieux” les corrélations entre les variables (cosinus des angles) et, si celles-ci ne sont pas réduites, leurs variances (longueurs).

Projection

Une variable X^j est représentée par la projection D -orthogonale $\widehat{Q}_q x^j$ sur le sous-espace F_q engendré par les q premiers axes factoriels. La coordonnée de x^j sur u^k est:

$$\langle x^j, u^k \rangle_D = x^{j'} D u^k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} x^{j'} D \bar{X} M v^k = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} e^{j'} \bar{X}' D \bar{X} M v^k = \sqrt{\lambda_k} v_j^k$$

PROPOSITION 3.4. — Les coordonnées de la projection D -orthogonale de x^j sur le sous-espace F_q sont les q premiers éléments de la j -ème ligne de la matrice $V \Lambda^{1/2}$.

Mesure de “qualité”

La qualité de la représentation de chaque x^j est donnée par le cosinus carré de l'angle qu'il forme avec sa projection:

$$[\cos \theta(x^j, \widehat{Q}_q x^j)]^2 = \frac{\|\widehat{Q}_q x^j\|_D^2}{\|x^j\|_D^2} = \frac{\sum_{k=1}^q \lambda_k (v_k^j)^2}{\sum_{k=1}^p \lambda_k (v_k^j)^2}$$

Corrélations variables×facteurs

Ces indicateurs aident à l'interprétation des axes factoriels en exprimant les corrélations entre variables principales et initiales.

$$\text{cor}(X^j, C^k) = \cos \theta(x^j, c^k) = \cos \theta(x^j, u^k) = \frac{\langle x^j, u^k \rangle_D}{\langle x^j \rangle_D} = \frac{\sqrt{\lambda_k}}{\sigma_j} v_j^k$$

ce sont les éléments de la matrice $\Sigma^{-1/2}V\Lambda^{1/2}$.

Cercle des corrélations

Dans le cas de variables réduites $\hat{x}^j = \sigma_j^{-1}x^j$, $\|\hat{x}^j\|_D = 1$, les \hat{x}^j sont sur la sphère unité S_n de F . L'intersection $S_n \cap F_2$ est un cercle centré sur l'origine et de rayon 1 appelé *cercle des corrélations*. Les projections de \hat{x}^j et x^j sont colinéaires, celle de \hat{x}^j étant à l'intérieur du cercle:

$$\|\widehat{Q_2}\hat{x}^j\|_D = \cos\theta(x^j, \widehat{Q_2}x^j) \leq 1$$

Ainsi, plus $\widehat{Q_2}x^j$ est proche de ce cercle, meilleure est la qualité de sa représentation. Ce graphique est commode à interpréter à condition de se méfier des échelles, le cercle devenant une ellipse si elles ne sont pas égales. Comme pour les individus, la taille des caractères est aussi fonction de la qualité des représentations.

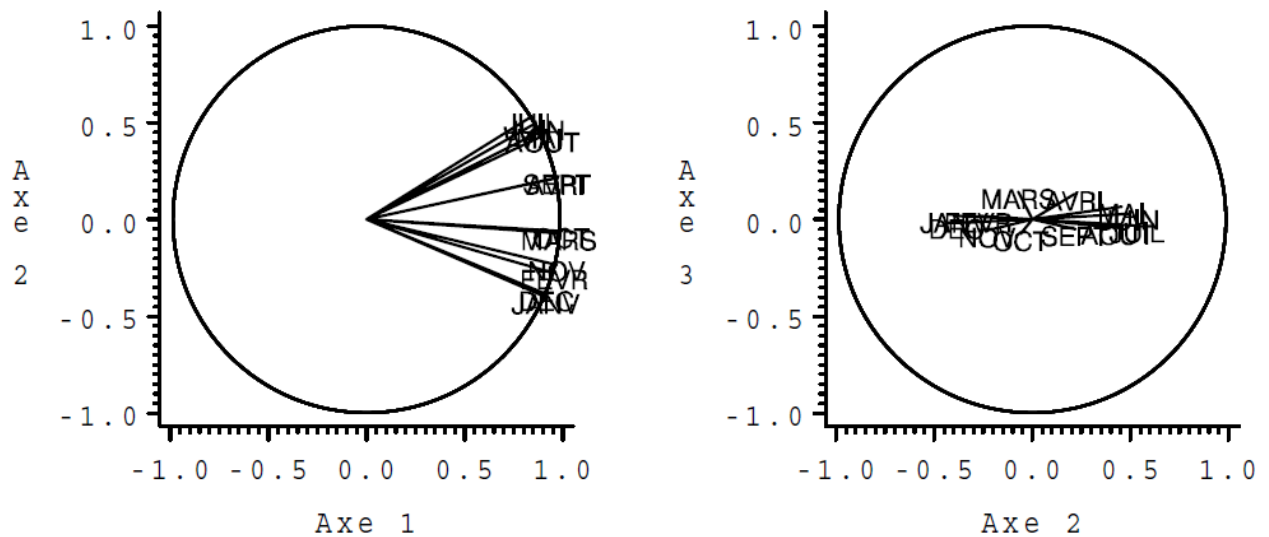


FIG. 3.5 – Températures : Premier et deuxième plan des variables.

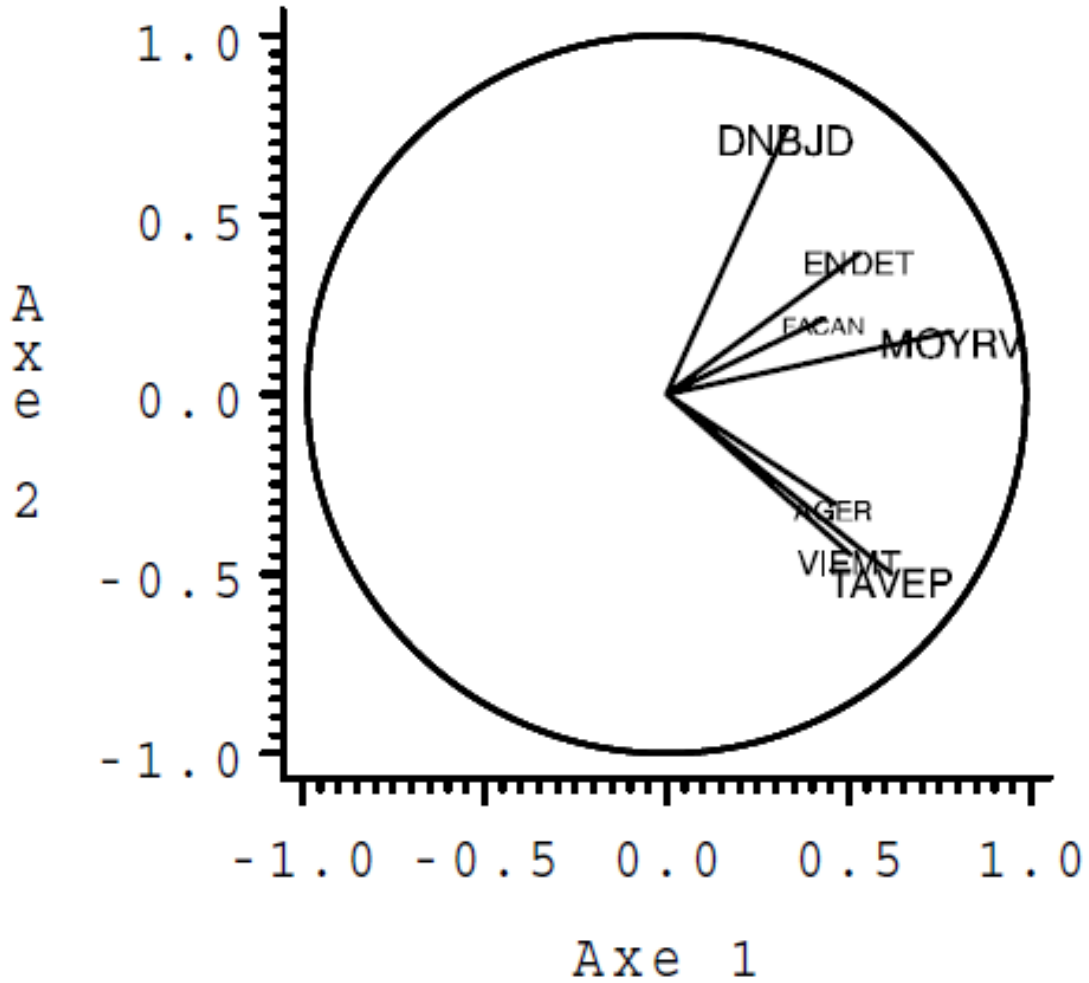


FIG. 3.6 – Carte Visa : la représentation des variables dans le premier plan de l’ACP fournit une interprétation classique (stocks versus flux) de ce type de données.

III.5.3. Représentation simultanée ou “biplot”

A partir de la décomposition en valeurs singulières de (\bar{X}, M, D) , on remarque que chaque valeur

$$x_i^j - \bar{x}^j = \sum_{k=1}^p \sqrt{\lambda_k} u_i^k v_k^j = \left[U \Lambda^{\frac{1}{2}} V' \right]_i^j$$

s’exprime comme produit scalaire usuel des vecteurs

$$c_i = \left[U \Lambda^{\frac{1}{2}} \right]_i \text{ et } v^j \text{ ou encore } u_i \text{ et } \left[U \Lambda^{\frac{1}{2}} \right]_j$$

Pour $q = 2$, la quantité \hat{z}_i^j en est une approximation limitée aux deux premiers termes.

Cette remarque permet d'interpréter deux autres représentations graphiques en ACP projetant *simultanément* individus et variables.

- i. la représentation *isométrique ligne* utilise les matrices C et V ; elle permet d'interpréter les distances entre individus ainsi que les produits scalaires entre un individu et une variable qui sont, dans le premier plan principal, des approximations des valeurs observées $X^j(w_i)$;
- ii. la représentation isométrique *colonne* utilise les matrices U et $V\Lambda^{\frac{1}{2}}$; elle permet d'interpréter les angles entre vecteurs variables (corrélations) et les produits scalaires comme précédemment.

Remarques

- i. Dans le cas fréquent où $M = I_p$ et où les variables sont réduites, le point représentant X^j , en superposition dans l'espace des individus se confond avec un pseudo individu supplémentaire qui prendrait la valeur 1 (écart-type) pour la variable j et 0 pour les autres.
- ii. En pratique, ces différents types de représentations (simultanées ou non) ne diffèrent que par un changement d'échelle sur les axes ; elles sont très voisines et suscitent souvent les mêmes interprétations.

III.6. Choix de dimension

La qualité des estimations auxquelles conduit l'ACP dépend, de façon évidente, du choix de q , c'est-à-dire du nombre de composantes retenues pour reconstituer les données, ou encore de la dimension du sous-espace de représentation.

De nombreux critères de choix pour q ont été proposés dans la littérature. On présente ici ceux, les plus courants, basés sur une heuristique et un reposant sur une quantification de la stabilité du sous-espace de représentation. D'autres critères, non explicités, s'inspirent des pratiques statistiques décisionnelles; sous l'hypothèse que l'erreur admet une distribution *gaussienne*, on peut exhiber les lois asymptotiques des valeurs propres et donc construire des tests de nullité ou d'égalité de ces dernières. Malheureusement, outre la nécessaire hypothèse de normalité, ceci conduit à une procédure de tests emboîtés dont le niveau global est incontrôlable. Leur utilisation reste donc heuristique.

III.6.1. Part d'inertie

La "qualité globale" des représentations est mesurée par la part d'inertie expliquée:

$$r_q = \frac{\sum_{k=1}^q \lambda_k}{\sum_{k=1}^p \lambda_k}$$

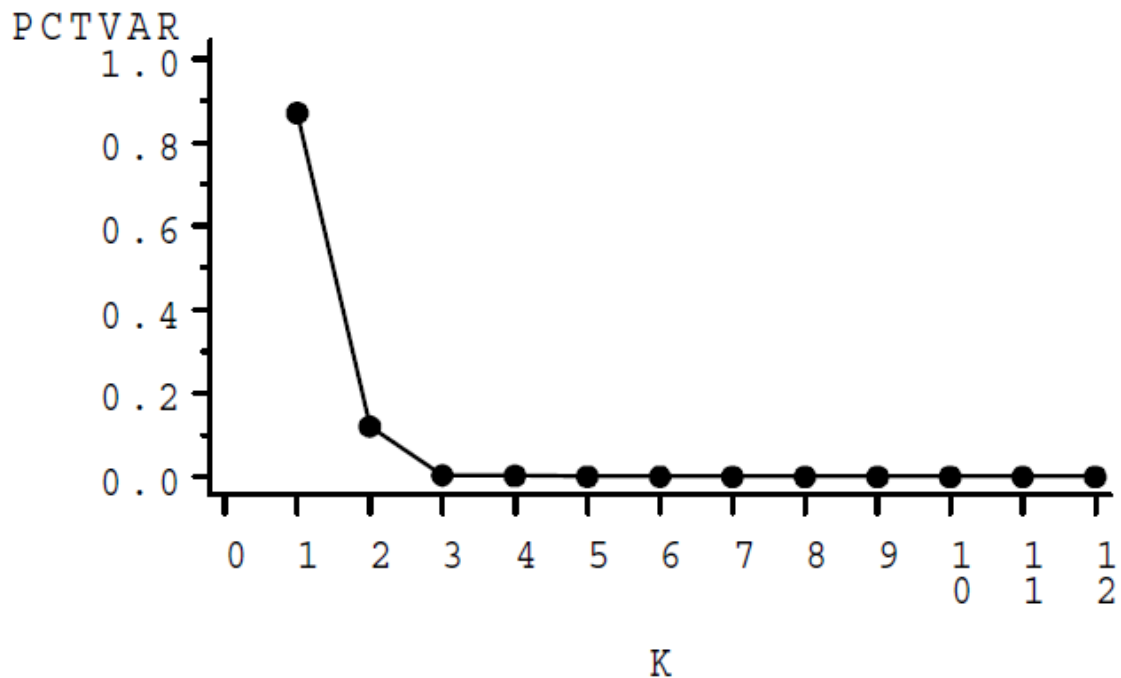


FIG. 3.7 – Températures : éboulis des valeurs propres.

La valeur de q est choisie de sorte que cette part d’inertie expliquée r_q soit supérieure à une valeur seuil fixée à priori par l’utilisateur. C’est souvent le seul critère employé.

III.6.2. Règle de Kaiser

On considère que, si tous les éléments de Y sont indépendants, les composantes principales sont toutes de variances égales (égales à 1 dans le cas de l’ACP réduite). On ne conserve alors que les valeurs propres supérieures à leur moyenne car seules jugées plus “informatives” que les variables initiales ; dans le cas d’une ACP réduite, ne sont donc retenues que celles plus grandes que 1. Ce critère, utilisé implicitement par SAS, a tendance à surestimer le nombre de composantes pertinentes.

III.6.3. Eboulis des valeurs propres

C’est le graphique présentant la décroissance des valeurs propres. Le principe consiste à rechercher, s’il existe, un “coude” (changement de signe dans la suite des différences d’ordre 2) dans le graphe et de ne conserver que les valeurs propres jusqu’à ce coude. Intuitivement, plus l’écart $(\lambda_q - \lambda_{q+1})$ est

significativement grand, par exemple supérieur à $(\lambda_{q-1} - \lambda_q)$, et plus on peut être assuré de la stabilité de \widehat{E}_q .

III.6.4. Boîtes-à-moustaches des variables principales

Un graphique présentant, en parallèle, les boîtes-à-moustaches des variables principales illustre bien leurs qualités: stabilité lorsqu'une grande boîte est associée à de petites moustaches, instabilité en présence d'une petite boîte, de grandes moustaches et de points isolés. Intuitivement, on conserve les premières "grandes boîtes". Les points isolés ou "outliers" désignent les points à forte contribution, ou potentiellement influents, dans une direction principale. Ils nécessitent une étude clinique : une autre analyse dans laquelle ils sont déclarés supplémentaires (poids nuls) afin d'évaluer leur impact sur l'orientation des axes.

III.6.5. Stabilité du sous-espace

La présentation de l'ACP, comme résultat de l'estimation d'un modèle, offre une autre approche au problème du choix de dimension. La qualité des estimations est évaluée de façon habituelle en statistique par un risque moyen quadratique définissant un critère de stabilité du sous

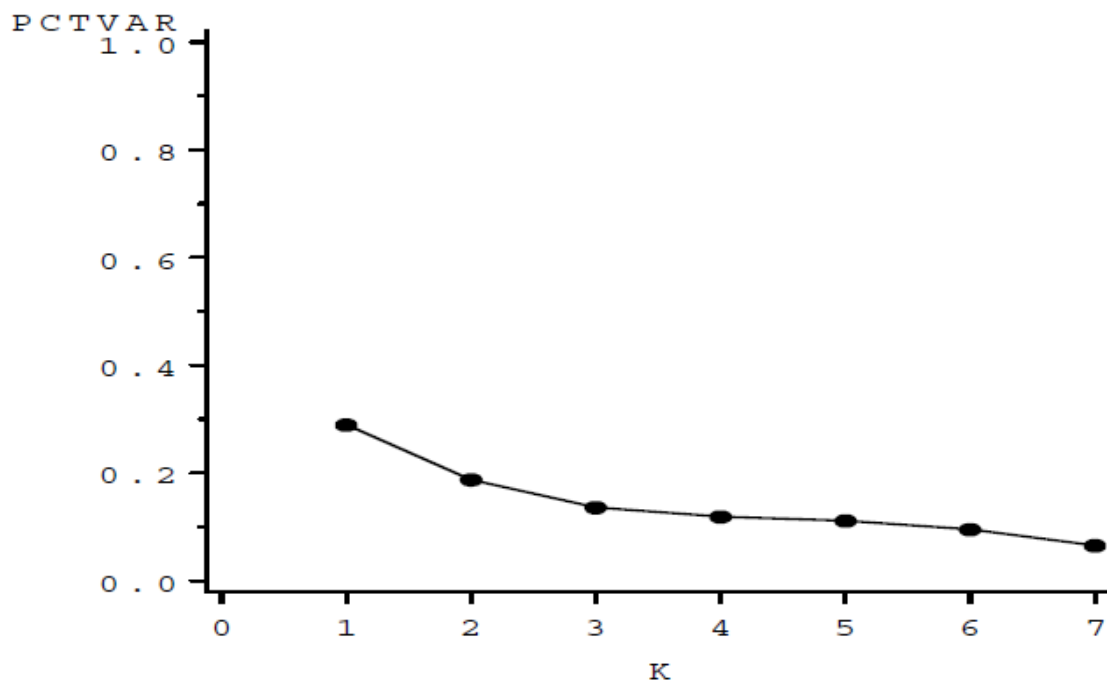


FIG. 3.8 – Carte Visa : éboulis des valeurs propres.

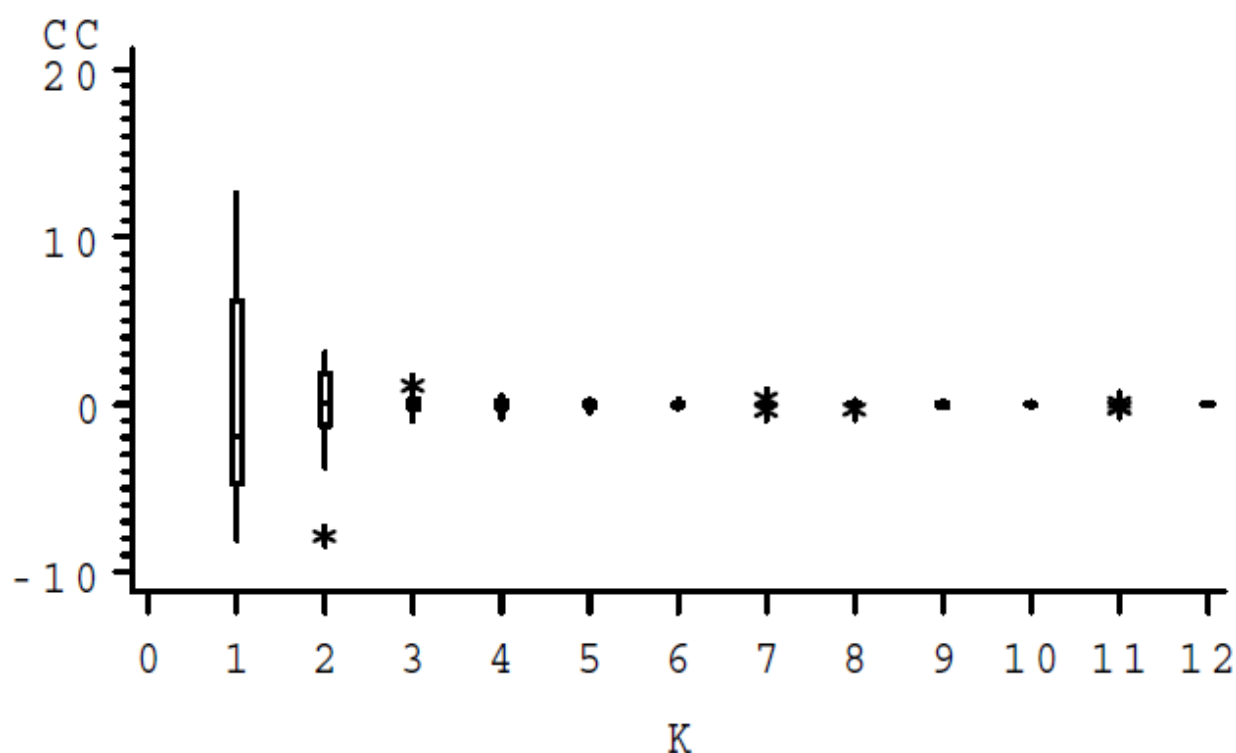


FIG. 3.9 – Températures : composantes en boîtes.

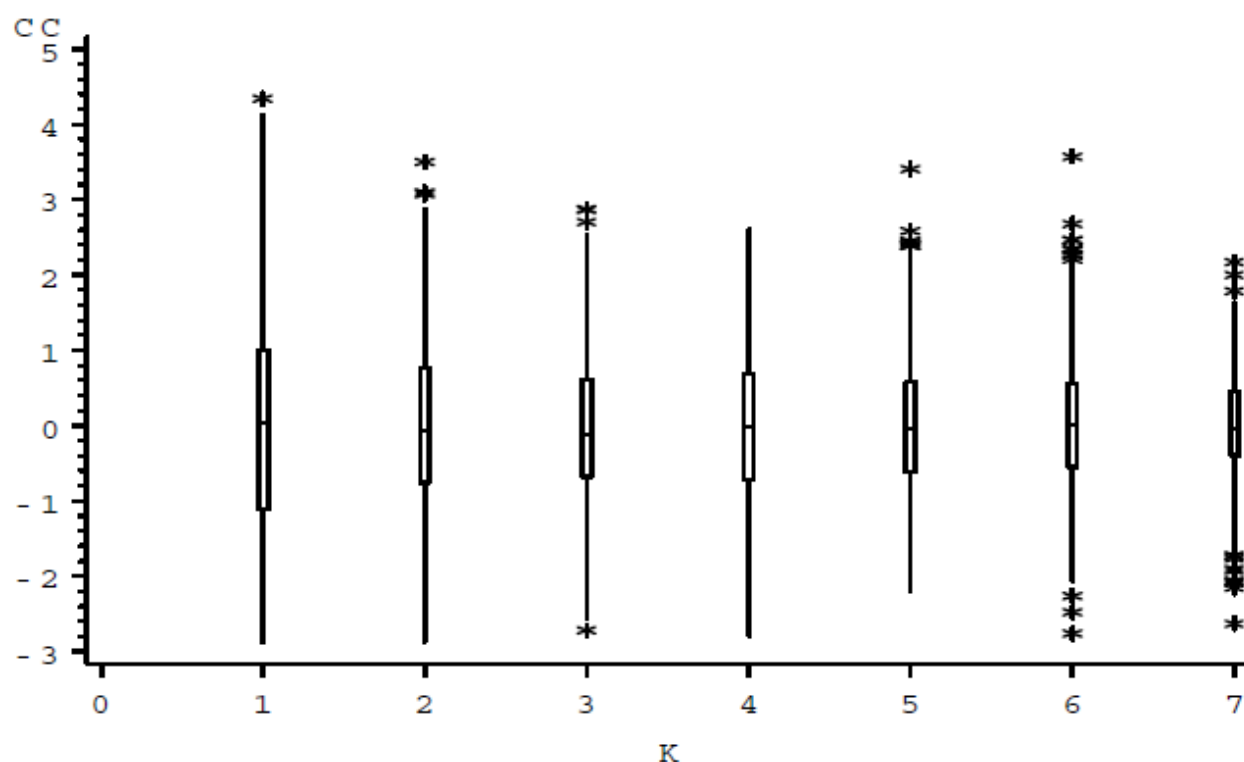


FIG. 3.10 – Carte Visa Premier: composantes en boîtes.

espace de représentation. Il est défini comme l'espérance d'une distance entre le modèle "vrai" et l'estimation qui en est faite. Besse (1992) propose d'étudier la

qualité de l'estimation du sous-espace de représentation \widehat{E}_q en considérant la fonction perte:

$$L_q = Q(E_q, \widehat{E}_q) = \frac{1}{2} \|P_q - \widehat{P}_q\|_{M,D}^2 = q - \text{tr} P_q \widehat{P}_q$$

où Q mesure la distance entre deux sous-espaces par la distance usuelle entre les matrices de projection qui leur sont associées. C'est aussi la somme des carrés des coefficients de corrélation canonique entre les ensembles de composantes ou de variables principales qui engendrent respectivement E_q et son estimation \widehat{E}_q .

Un risque moyen quadratique est alors défini en prenant l'espérance de la fonction perte:

$$R_q = EQ(E_q, \widehat{E}_q) \quad (3.4)$$

Sans hypothèse sur la distribution de l'erreur, seules des techniques de ré-échantillonnage (bootstrap, jackknife) permettent de fournir une estimation de ce risque moyen quadratique. Leur emploi est justifié, car le risque est invariant par permutation des observations, mais coûteux en temps de calcul. On se pose donc la question de savoir pour quelles valeurs de q les représentations graphiques sont fiables, c'est-à-dire stables pour des fluctuations de l'échantillon. Besse (1992) propose d'utiliser une approximation de l'estimateur par jackknife; elle fournit, directement à partir des résultats de l'A.C.P. (valeurs propres et composantes principales), une estimation satisfaisante du risque:

$$\widehat{R_{JKq}} = \widehat{R_{Pq}} + O((n-1)^{-2})$$

$\widehat{R_{JKq}}$ est une approximation analytique de l'estimateur jackknife qui a pour expression:

$$\widehat{R_{Pq}} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^q \sum_{j=q+1}^p \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (c_i^k)^2 (c_i^j)^2}{(\lambda_j - \lambda_q)^2} \quad (3.5)$$

où c_i^j désigne le terme général de la matrice des composantes principales C .

Ce résultat souligne l'importance du rôle que joue l'écart $(\lambda_q - \lambda_{q+1})$ dans la stabilité du sous-espace de représentation. Le développement est inchangé dans le cas d'une ACP réduite; de plus, il est valide tant que

$$n > \frac{\|S\|_2^2}{\inf\{(\lambda_k - \lambda_{k+1}); k = 1, \dots, q\}}$$

La figure 3.11 montrent la stabilité du sous-espace de représentation en fonction de la dimension q pour l'A.C.P. des données de températures. Comme souvent, le premier axe est très stable tandis que le premier plan reste fiable. Au-delà, les axes étant très sensibles à toute perturbation des données, ils peuvent être associés au bruit. Ces résultats sont cohérents avec les deux critères graphiques précédents mais souvent, en pratique, le critère de stabilité conduit à un choix de dimension plus explicite.

III.7. Interprétation

Les macros SAS décrites en exemple, de même que la plupart des logiciels, proposent, ou autorisent, l'édition des différents indicateurs (contributions, qualités, corrélations) et graphiques définis dans les paragraphes précédents.

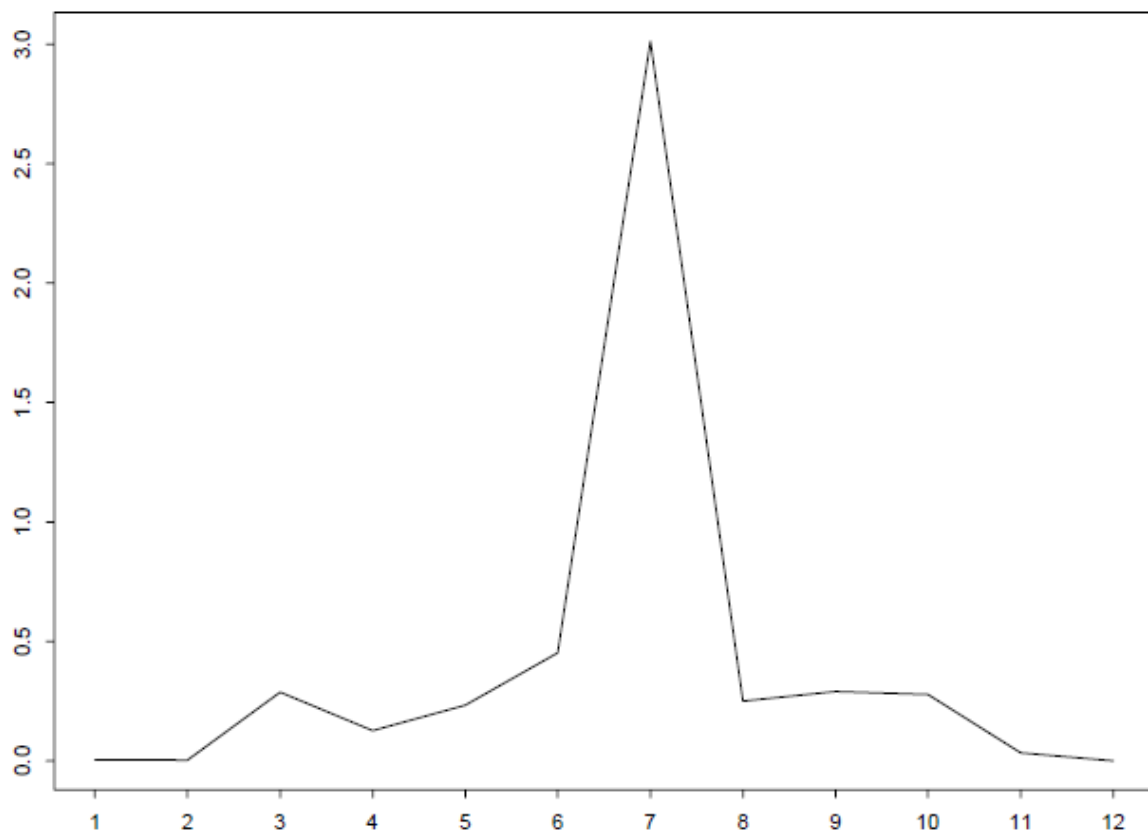


FIG. 3.11 – Températures: stabilité des sous-espaces.

- Les *contributions* permettent d'identifier les individus très influents pouvant déterminer à eux seuls l'orientation de certains axes; ces points sont vérifiés, caractérisés, puis éventuellement considérés comme supplémentaires dans une autre analyse.
- Il faut choisir le nombre de composantes à retenir, c'est-à-dire la dimension des espaces de représentation.
- Les axes factoriels sont interprétés par rapport aux variables initiales bien représentées.
- Les graphiques des individus sont interprétés, en tenant compte des qualités de représentation, en termes de regroupement ou dispersions par rapport aux axes factoriels et projections des variables initiales.

Les quelques graphiques présentés suffisent, dans la plupart des cas, à l'interprétation d'une ACP classique et évitent la sortie volumineuse, lorsque n est grand, des tableaux usuels d'aide à l'interprétation.

Remarque. — L'ACP est une technique linéaire optimisant un critère quadratique ; elle ne tient donc pas compte d'éventuelles liaisons non linéaires et présente une forte sensibilité aux valeurs extrêmes.

IV. OPTIMISATION ET RECHERCHE OPERATIONNELLE

IV.1. Problème d'optimisation sans contraintes

Le problème d'optimisation est formulé comme suit: on donne un ensemble X (l'ensemble des problèmes possibles) et une fonction $f(x)$ (*fonction économique*), définie sur X ; il faut trouver un point minimal ou maximal de la fonction f sur X . Le problème d'optimisation où la fonction économique est à minimiser est de type suivant:

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min \\ x &\in X \end{aligned} \tag{1.1}$$

Le point $x^* \in X$ est dit minimum global de $f(x)$ sur l'ensemble X , ou solution globale du problème (1.1) si

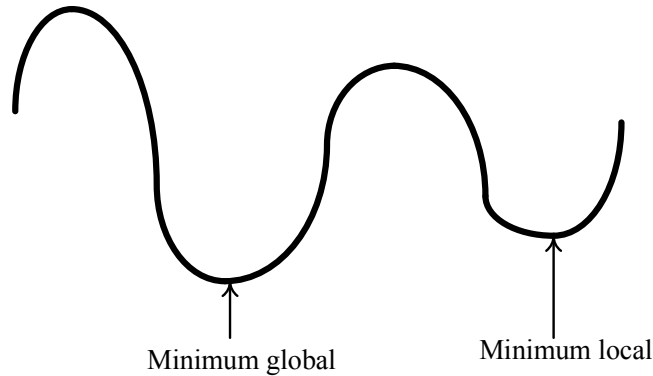
$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in X$$

Le point $x^* \in X$ est dit minimum local sur l'ensemble X , ou solution locale du problème (1.1) si

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in X \cap V_\varepsilon(x^*)$$

où $V_\varepsilon(x^*) = \{x \in R^n: \|x - x^*\| \leq \varepsilon\}$ – cercle de rayon $\varepsilon > 0$ et de centre x^* .

Autrement dit $x^* \in X$ est un minimum local si $f(x^*) \leq f(x)$ pour x dans un voisinage de x^*



Il est donc clair que la solution globale est aussi locale ; mais pas inversement.

Le problème (1.1) est appelé problème d'optimisation sans contraintes, si $X = R^n$.

IV.1.1. Fonction à une seule variable

Pour une fonction à une seule variable les contraintes d'optimisation sont formulées comme suit:

Condition nécessaire d'optimum local. Soit $f(x)$ différentiable en $x^* \in R^1$. Si x^* – est un point optimal (extrémal) local, alors

$$f'(x^*) = 0 \quad (1.2)$$

Les points qui satisfont (1.2) sont appelés *points stationnaires*. Les points stationnaires peuvent être des points locaux minimaux, des points locaux maximaux et des points d'inflexion. Pour déterminer le caractère des points stationnaires on utilise la condition suffisante d'optimum local.

Condition suffisante d'optimum local. Soit $f(x)$ k fois, $k > 1$, différentiable en $x^* \in R^1$, et

$$f'(x^*) = f''(x^*) = \dots = f^{(k-1)}(x^*) = 0, f^{(k)}(x^*) \neq 0$$

Si k est un nombre paire, alors le point x^* – minimum (maximum) local pour $f^{(k)}(x^*) > 0$ (pour $f^{(k)}(x^*) < 0$).

Si k est un nombre impaire, alors x^* – point d’inflexion.

En utilisant la condition nécessaire et suffisante d’optimum, on trouve les points extrémaux locaux. Pour déterminer les points globaux extrémaux on calcule les valeurs de $f(x)$ (avec $x \rightarrow \infty$ et $x \rightarrow -\infty$). Si

$$V \equiv \max\{\lim_{x \rightarrow \infty} f(x), \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x)\} = +\infty$$

, alors $f(x)$ n’a pas de maximum global fini. Si

$$W \equiv \min\{\lim_{x \rightarrow \infty} f(x), \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x)\} = -\infty$$

, alors $f(x)$ n’a pas de minimum global fini.

Si $f(x)$ possède un extrémum global fini, alors on calcule aussi les valeurs $f(x)$ sur l’ensemble des points locaux extrémaux. La plus petite des valeurs obtenues c’est-à-dire les valeurs de $f(x)$ aux points locaux extrémaux et les valeurs limites $f(x)$, détermine le minimum global, la plus grande des valeurs obtenues – le maximum global de $f(x)$.

Algorithme de calcul des points locaux et globaux extrémaux d’une fonction à une seule variable.

1. On calcul $f'(x)$.
2. On calcule les racine de l’équation $f'(x) = 0$ – points stationnaires $x_{(i)}, i \in I = \{1, 2, \dots, N\}$, où N – nombre des points stationnaires.
On initialise $k = 2$.
3. On trouve $f^{(k)}(x)$.
4. On calcule les valeurs de $f^{(k)}(x_{(i)}), i \in I$.
Si $f^{(k)}(x_{(i)}) \neq 0$, alors on détermine le type du point stationnaire $x_{(i)}$ et son numéro est supprimé de l’ensemble I .
5. On vérifie la condition de détermination de tous les points stationnaires

$$I = \emptyset$$

Si la condition est vérifiée, alors on passe au point 6.

Si la condition n’est pas vérifiée, alors on pose $k = k + 1$ et on passe au point 3.

6. On calcule les valeurs limites (avec $x \rightarrow \infty$ et $x \rightarrow -\infty$) de $f(x)$.

Si $f(x)$ n'a pas de points globaux extrémaux, alors on arrête les calculs.

Au cas contraire on effectue un passage au point 7.

7. On calcule les valeurs de $f(x)$ sur l'ensemble des points locaux extrémaux. Par la plus petite des valeurs obtenues de f on détermine le point minimal global, par la plus grande des valeurs obtenues de f – le point maximal global.

Exemple. Déterminer les points locaux et globaux (extrémaux) de la fonction $f(x) = (1 - x)^3$.

Solution

On trouve la dérivée première de la fonction $f(x)$:

$$f'(x) = -3(1 - x)^2$$

On détermine les racines de l'équation $f'(x) = 0$:

$$-3(1 - x)^2 = 0 \Rightarrow (1 - x)^2 = 0 \Rightarrow x_{(1)} = 1$$

On a obtenu un point stationnaire ($I = \{1\}$) $x_{(1)} = 1$

On détermine le caractère du point stationnaire.

On trouve la dérivée seconde de la fonction $f(x)$:

$$f''(x) = 6(1 - x)$$

On calcule la valeur de $f''(x)$ au point $x_{(1)}$:

$$f''(x_{(1)} = 1) = 0$$

Puisque le caractère du point stationnaire n'est pas défini, on trouve la dérivée troisième de la fonction $f(x)$:

$$f'''(x) = -6 \neq 0$$

Puisque le rang k de la première dérivée ne tendant pas vers zéro au point $x = 1$ est un nombre impaire ($k = 3$), alors le point $x = 1$ est un point d'inflexion ($I = \emptyset$).

On calcule les valeurs limites de la fonction $f(x)$:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} f(1-x)^3 = \left\{ \lim_{x \rightarrow \infty} f(1-x) \right\}^3 = (1-\infty)^3 = -\infty$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow -\infty} f(1-x)^3 = \left\{ \lim_{x \rightarrow -\infty} f(1-x) \right\}^3 = (1-\infty)^3 = \infty$$

Puisque

$$V \equiv \max \left\{ \lim_{x \rightarrow \infty} f(x), \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) \right\} = +\infty$$

Alors $f(x)$ ne possède pas de maximum global fini.

Puisque

$$W \equiv \min \left\{ \lim_{x \rightarrow \infty} f(x), \lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) \right\} = -\infty$$

Alors $f(x)$ ne possède pas de minimum global fini.

Réponse: la fonction $f(x) = (1-x)^3$ ne possède pas d'extrémums.

IV.1.2. Fonction à n variables

Pour la fonction $f(x)$ à n variables le point x est un vecteur, $f'(x)$ – vecteur des dérivées premières (gradient) de la fonction $f(x)$, $f''(x)$ – matrice symétrique des dérivées secondes partielles (matrice Hessienne) de la fonction $f(x)$.

Pour une fonction à n variables les contraintes d'optimisation sont formulées comme suit :

Condition nécessaire d'optimum local. Soit $f(x)$ différentiable en $x^* \in R^n$. Si x^* est un point optimal (extrémal) local, alors

$$f'(x^*) = 0 \tag{1.3}$$

Les points qui satisfont (1.3) sont appelés *points stationnaires*. Le caractère du point stationnaire x^* est déterminé par le signe de la matrice Hessienne $f''(x^*)$. Le signe de la matrice A dépend des signes des formes carrées $(\alpha) = \langle \alpha A, \alpha \rangle \forall \alpha \neq 0, \alpha \in R^n$. Pour la suite par $\langle x, y \rangle$ on note le produit scalaire canonique des vecteurs x et y . Par définition,

$$\langle x, y \rangle = \sum_{j=1}^n x_j y_j$$

La matrice A est définie positive (non négative), si $Q(\alpha) > 0 (Q(\alpha) \geq 0), \forall \alpha \neq 0, \alpha \in R^n$; définie négative (non positive), si $Q(\alpha) < 0 (Q(\alpha) \leq 0), \forall \alpha \neq 0, \alpha \in R^n$; non définie, si $Q(\alpha) \geq 0$ pour quelques valeurs de $\alpha \neq 0$ et $\alpha \in R^n$ et $Q(\alpha) < 0$ pour les autres valeurs de $\alpha \neq 0$ et $\alpha \in R^n$.

Condition suffisante d'optimum local. Soit $f(x^*) = 0$ différentiable deux fois en $x^* \in R^n$, de plus $f'(x^*) = 0$, c'est-à-dire x^* – point stationnaire. Si la matrice $f''(x^*)$ est définie positive (non négative), alors x^* – point optimal local; Si la matrice $f''(x^*)$ n'est pas définie, alors x^* – point d'inflexion;

Si la matrice $f''(x^*)$ est définie négative (non positive), alors pour déterminer le caractère du point stationnaire x^* l'étude des dérivées de rang supérieur est nécessaire.

Pour vérifier le signe de la matrice, comme règle, on utilise le critère de Sylvestre. Selon ce critère, une matrice symétrique A définie positive si et seulement si tous ses mineurs sont positifs. Par **mineur** de la matrice A , on entend le déterminant: $\det(A^{(i,j)})$ où $A^{(i,j)}$ désigne la matrice d'ordre $n - 1$ obtenue à partir de la matrice A en lui supprimant la ligne i et la colonne j . On appelle **cofacteur** de l'élément a_{ij} de la matrice A le nombre réel $c_{ij} = (-1)^{i+j} \det(A^{(i,j)})$.

Pour vérifier que la matrice symétrique A est définie négative, il faut vérifier la matrice $(-A)$ est définie positive.

Algorithme de calcul des points locaux et globaux extrémaux d'une fonction à n variable.

1. On calcul $f'(x)$.
2. On résout le système

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x_j} = 0, j = \overline{1, n}$$

On détermine les points stationnaires $x_{(i)}, i = \overline{1, N}$.

3. On trouve $f''(x)$, on pose $i = 1$.
4. On trouve $f''(x_{(i)})$,
5. On calcule les mineurs de la matrice $f''(x_{(i)})$.
Si tous les mineurs de $f''(x_{(i)})$ ne sont pas nuls, alors pour déterminer le caractère du point stationnaire $x_{(i)}$ l'étude des dérivées de rang supérieur est nécessaire. Dans ce cas on effectue le passage au point 8.
Au cas contraire on effectue le passage au point 6.
6. On analyse les signes des mineurs de $f''(x_{(i)})$.
Si $f''(x_{(i)})$ est définie positive, alors $x_{(i)}$ est un point minimal local.
Dans ce cas on effectue le passage au point 8.
Au cas contraire on effectue le passage au point 7.
7. On calcule les mineurs de la matrice $[-f''(x_{(i)})]$ et on analyse leurs signes.
Si $[-f''(x_{(i)})]$ est définie positive, alors $f''(x_{(i)})$ est définie négative et $x_{(i)}$ est un point maximal local.
Au cas contraire $f''(x_{(i)})$ n'est pas définie et $x_{(i)}$ est un point d'inflexion.
8. On vérifie la condition de définition du caractère de tous les points stationnaires

$$i = N$$

Si la condition est vérifiée, alors les calculs s'achèvent.

Si la condition n'est pas vérifiée, alors on pose $i = i + 1$ et on effectue le passage au point 4.

Exemple. Déterminer les points locaux extrémaux de la fonction:

$$f(x) = x_1^3 - 2x_1x_2 + x_2^2 - 3x_1 - 2x_2$$

Solution.

On trouve les premières dérivées partielles de $f(x)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 3x_1^2 - 2x_2 - 3 ; \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = -2x_1 + 2x_2 - 2$$

On résout le système d'équations:

$$\begin{cases} 3x_1^2 - 2x_2 - 3 = 0 & (1) \\ -2x_1 + 2x_2 - 2 = 0 & (2) \end{cases}$$

$$(2) \Rightarrow 2x_1 = 2x_2 - 2 \Rightarrow x_1 = x_2 - 1 \quad (3)$$

$$(3) \text{ dans } (1) \Rightarrow 3(x_2 - 1)^2 - 2x_2 - 3 = 3x_2^2 - 8x_2 = x_2(3x_2 - 8) = 0$$

$$\Rightarrow x_{(1)2} = 0, \quad x_{(2)2} = \frac{8}{3}$$

Respectivement

$$x_{(1)1} = -1, \quad x_{(2)1} = \frac{5}{3}$$

On a obtenu deux points stationnaires ($N=2$):

$$x_{(1)} = (-1, 0), x_{(2)} = \left(\frac{5}{3}, \frac{8}{3}\right)$$

On trouve les dérivées secondes partielles de $f(x)$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} = 6x_1, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} = -2, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} = 2$$

On construit la matrice Hessienne

$$f''(x) = \begin{bmatrix} 6x_1 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}$$

On détermine le caractère du point stationnaire $x_{(1)}$. On trouve $f''(x_{(1)})$:

$$f''(x_{(1)}) = \begin{bmatrix} -6 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}$$

On calcule les mineurs de $f''(x_{(1)})$:

$$M_1 = |-6| = -6 < 0$$

$$M_2 = \begin{vmatrix} -6 & -2 \\ -2 & 2 \end{vmatrix} = (-6)2 - (-2)(-2) = -16 < 0$$

Puisque tous les mineurs ne sont pas nuls, alors le caractère $x_{(1)}$ sera déterminé à l'aide de $f''(x)$.

Puisque la matrice $f''(x_{(1)})$ n'est pas définie positive, alors on analyse la matrice $[-f''(x_{(1)})]$:

$$-f''(x_{(1)}) = \begin{bmatrix} 6 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}$$

On calcule les mineurs $[-f''(x_{(1)})]$:

$$M_1 = |6| = 6 > 0$$

$$M_2 = \begin{vmatrix} 6 & 2 \\ 2 & -2 \end{vmatrix} = 6(-2) - 2 \cdot 2 = -16 < 0$$

Puisque la matrice $[-f''(x_{(1)})]$ n'est pas définie positive, alors $f''(x_{(1)})$ n'est pas définie négative. Par conséquent, la matrice $f''(x_{(1)})$ n'est pas définie et $x_{(1)}$ est un point d'inflexion.

On détermine le caractère du point stationnaire $x_{(2)}$. On trouve $f''(x_{(2)})$:

$$f''(x_{(2)}) = \begin{bmatrix} 10 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}$$

On calcule les mineurs de $f''(x_{(2)})$:

$$M_1 = |10| = 10 > 0$$

$$M_2 = \begin{vmatrix} 10 & -2 \\ -2 & 2 \end{vmatrix} = 10 \cdot 2 - (-2)(-2) = 16 > 0$$

Puisque tous les mineurs ne sont pas nuls, alors le caractère $x_{(2)}$ sera déterminé à l'aide de $f''(x)$.

Puisque la matrice $f''(x_{(2)})$ est définie positive, alors $x_{(2)}$ est un minimum local.

Réponse: La fonction $f(x) = x_1^3 - 2x_1x_2 + x_2^2 - 3x_1 - 2x_2$ possède au point $x = \left(\frac{5}{3}, \frac{8}{3}\right)$ un minimum local.

IV.2. Problème d'optimisation sous contraintes

Le problème d'optimisation (minimisation)

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$x \in X$$

est appelé problème d'optimisation sous contraintes, si X – sous ensemble du plan R^n ($X \subset R^n, X \neq R^n$).

En pratique on analyse le problème d'optimisation avec un ensemble X donné à l'aide d'un système d'équations finies:

$$X = \{x \in R^n : g_i(x) = 0, i = \overline{1, m}\}$$

On suppose que $m < n$.

En général ce problème est donné sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} f(x) &\rightarrow \min \\ g_i(x) &= 0, i = \overline{1, m} \end{aligned} \quad (2.1)$$

Pour résoudre le problème (2.1) on utilise la méthode des multiplicateurs de Lagrange. L'idée de la méthode consiste en un passage du problème à extrémums sous contraintes de la fonction initiale $f(x)$ au problème à extrémums sans contraintes d'une fonction de Lagrange $L(x, \lambda)$

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)$$

où $x \in R^n, \lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \in R^m$.

Condition nécessaire d'optimum local. Soient $f(x), g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x)$ différentiables au point $x^* \in R^n$. Si x^* – point extrémal local, alors il existe un vecteur $\lambda^* = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_m^*)$, dont les composants sont en même temps différents de zéro, de sorte que

$$\begin{aligned} \lambda'_x(x^*, \lambda^*) &= 0 \\ L'_\lambda(x^*, \lambda^*) &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

où $\lambda'_x(x, \lambda), L'_\lambda(x, \lambda)$ – respectivement les vecteurs des dérivées premières partielles de la fonction de Lagrange par rapport à $x_j, j = \overline{1, n}$ et $\lambda_i, i = \overline{1, m}$.

De plus doivent être vérifiées les conditions de régularité: les gradients $g'_1(x^*), g'_2(x^*), \dots, g'_m(x^*)$ doivent être linéairement indépendants. Cela signifie que le rang de la matrice G' , dont les lignes sont les gradients $g'_i(x^*)$, doit être égal à m .

Tout point x^* satisfaisant, $\forall \lambda^* \neq 0$, les conditions (2.2) est appelé point stationnaire du problème (2.1).

Pour déterminer le caractère des points stationnaires on utilise la condition suffisante d'optimum en utilisant la matrice $L''_{xx}(x, \lambda)$ des dérivées secondes partielles de la fonction de Lagrange par rapport à $x_j, j = \overline{1, n}$.

Condition suffisante d'optimum local. Soient $f(x), g_1(x), g_2(x), \dots, g_m(x)$ deux fois différentiables au point $x^* \in R^n$, de plus $\forall \lambda^* \neq 0$ les conditions (2.2) sont vérifiées, c'est-à-dire x^* – point stationnaire. Si

$$\langle \alpha L''_{xx}(x^*, \lambda^*), \alpha \rangle > 0 \quad (\langle \alpha L''_{xx}(x^*, \lambda^*), \alpha \rangle < 0)$$

pour toutes les valeurs non nulles $\alpha \in R^n$, pour lesquelles

$$\langle g'_i(x^*), \alpha \rangle = 0, i = \overline{1, m}$$

alors x^* – point minimal (maximal) local de la fonction $f(x)$ sur l'ensemble X .

Algorithme de détermination des points extrémaux locaux sous contraintes est le suivant:

1. On formule la fonction de Lagrange $L(x, \lambda)$.
2. On trouve $L'_x(x, \lambda)$
3. On résout le système

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_j} &= 0, \quad j = \overline{1, n} \\ \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} &= g_i(x) = 0, \quad i = \overline{1, m} \end{aligned}$$

Par après on détermine les points stationnaires $x_l, l = \overline{1, N}$, et les valeurs correspondantes $\lambda_{(l)}, l = \overline{1, N}$.

4. On trouve $\langle g'_i(x), \alpha \rangle, i = \overline{1, m}$
5. On trouve $L''_{xx}(x, \lambda)$, on pose $l = 1$.
6. On trouve $L''_{xx}(x_{(l)}, \lambda_{(l)})$. On forme une matrice carrée $Q_l(\alpha)$, donnée par la matrice $L''_{xx}(x_{(l)}, \lambda_{(l)})$:

$$Q_l(\alpha) = \langle \alpha L''_{xx}(x_{(l)}, \lambda_{(l)}), \alpha \rangle$$

7. On résout le système

$$\langle g'_i(x_{(l)}), \alpha \rangle = 0, i = \overline{1, m}$$

Par suite on détermine les points $\alpha_{(r)}$.

8. On calcule les valeurs $Q_l(\alpha_{(r)})$ et on analyse leurs signes.

Si $Q_l(\alpha_{(r)}) > 0$; $\forall \alpha_{(r)} \neq 0$, alors $x_{(l)}$ – point minimal local sous contraintes.

Si $Q_l(\alpha_{(r)}) < 0$; $\forall \alpha_{(r)} \neq 0$, alors $x_{(l)}$ – point maximal local sous contraintes.

9. On vérifie la condition de détermination du caractère de tous les points stationnaires

$$l = N$$

Si la condition est vérifiée, alors les calculs s'achèvent.

Si la condition n'est pas vérifiée, alors on pose $l = l + 1$ et on passe au point 6.

Exemple. Déterminez les points extrémaux locaux de la fonction :

$$f(x) = \frac{1}{2}ax_1^2 + \frac{1}{2}bx_2^2, a > 0, b > 0$$

sous contrainte

$$x_1^3 + x_2^3 = 1$$

Solution

On formule la fonction de Lagrange

$$L(x, \lambda) = \frac{1}{2}ax_1^2 + \frac{1}{2}bx_2^2 + \lambda(x_1^3 + x_2^3 - 1)$$

On trouve $L'_x(x, \lambda)$:

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_1} = ax_1 + 3\lambda x_1^2, \quad \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_2} = bx_2 + 3\lambda x_2^2$$

On résout le système d'équations

$$\begin{cases} ax_1 + 3\lambda x_1^2 = x_1(a + 3\lambda x_1) = 0 & (1) \\ bx_2 + 3\lambda x_2^2 = x_2(b + 3\lambda x_2) = 0 & (2) \\ x_1^3 + x_2^3 - 1 = 0 & (3) \end{cases}$$

(1) $\Rightarrow x_1 = 0$ ou $a + 3\lambda x_1 = 0$. (2) $\Rightarrow x_2 = 0$ ou $b + 3\lambda x_2 = 0$. A cause de (3) on ne peut pas avoir en même temps $x_1 = 0$ et $x_2 = 0$. Par conséquent le système possède trois solutions.

1) Soit $x_1 = 0$. De l'équation (3) on déduit que $x_2 = 1$. Puisque $x_2 \neq 0$, pour que (2) soit vérifiée on doit avoir $b + 3\lambda x_2 = 0$, d'où $\lambda = -\frac{b}{3}$.

De cette manière, on a obtenu le premier point stationnaire $x_{(1)}$ et $\lambda_{(1)}$:

$$x_{(1)} = (0,1), \lambda_{(1)} = -\frac{b}{3}$$

2) Soit $x_2 = 0$. De l'équation (3) on déduit que $x_1 = 1$. Puisque $x_1 \neq 0$, pour que (1) soit vérifiée on doit avoir $a + 3\lambda x_1 = 0$, d'où $\lambda = -\frac{a}{3}$.

De cette manière, on a obtenu le second point stationnaire $x_{(2)}$ et $\lambda_{(2)}$:

$$x_{(2)} = (1,0), \lambda_{(2)} = -\frac{a}{3}$$

3) Soit $x_1 \neq 0$ et $x_2 \neq 0$. Pour que (1) soit vérifiée on doit avoir $a + 3\lambda x_1 = 0$, d'où $\lambda = -\frac{a}{3x_1}$. Pour que (2) soit vérifiée on doit avoir $b + 3\lambda x_2 = 0$, d'où $\lambda = -\frac{b}{3x_2}$. En égalisant les expressions de λ , on obtient $x_2 = \frac{b}{a}x_1$.

En remplaçant la nouvelle expression dans l'équation (3), on trouve x_1 :

$$x_1^3 + \left(\frac{b}{a}x_1\right)^3 - 1 = 0 \Rightarrow x_1^3 \frac{a^3 + b^3}{a^3} = 1 \Rightarrow x_1 = \frac{a}{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}$$

On trouve x_2 et λ :

$$x_2 = \frac{b}{a}x_1 = \frac{b}{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}, \lambda = -\frac{a}{3x_1} = -\frac{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}{3}$$

De cette manière, on a obtenu le troisième point stationnaire $x_{(3)}$ et $\lambda_{(3)}$:

$$x_{(3)} = \left(\frac{a}{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}, \frac{b}{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}\right), \lambda_{(3)} = -\frac{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}{3}$$

On trouve $\langle g'_i(x), \alpha \rangle$:

$$\frac{\partial g(x)}{\partial x_1} = 3x_1^2, \frac{\partial g(x)}{\partial x_2} = 3x_2^2$$

$$\langle (3x_1^2, 3x_2^2), (\alpha_1, \alpha_2) \rangle = 3x_1^2\alpha_1 + 3x_2^2\alpha_2$$

On trouve $L''_{xx}(x, \lambda)$:

$$\frac{\partial^2 L(x, \lambda)}{\partial x_1^2} = a + 6\lambda x_1, \quad \frac{\partial^2 L(x, \lambda)}{\partial x_1 \partial x_2} = 0, \quad \frac{\partial^2 L(x, \lambda)}{\partial x_2^2} = b + 6\lambda x_2,$$

$$L''_{xx}(x, \lambda) = \begin{bmatrix} a + 6\lambda x_1 & 0 \\ 0 & b + 6\lambda x_2 \end{bmatrix}$$

On détermine le caractère du point stationnaire $x_{(1)}$. On trouve $L''_{xx}(x_{(1)}, \lambda_{(1)})$:

$$L''_{xx}(x_{(1)}, \lambda_{(1)}) = \begin{bmatrix} a + 6\left(-\frac{b}{3}\right) & 0 \\ 0 & b + 6\left(-\frac{b}{3}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & -b \end{bmatrix}$$

On établit la forme carrée $Q_1(\alpha)$:

$$\alpha L''_{xx}(x_{(1)}, \lambda_{(1)}) = (\alpha_1, \alpha_2) \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & -b \end{bmatrix} = (a\alpha_1, -b\alpha_2),$$

$$Q_1(\alpha) = \langle (a\alpha_1, -b\alpha_2), (\alpha_1, \alpha_2) \rangle = a\alpha_1^2 - b\alpha_2^2$$

On résout l'équation $\langle g'(x_{(1)}), \alpha \rangle = 0$:

$$3.0. \alpha_1 + 3.1. \alpha_2 = 0 \Rightarrow 3\alpha_2 = 0$$

La solution est formée par les points $\alpha_{(r)} = (\alpha_1, 0)$.

On calcule les valeurs de $Q_1(\alpha_{(r)})$:

$$Q_1(\alpha_{(r)}) = a\alpha_1^2 > 0, \forall \alpha_1 \neq 0$$

Puisque $Q_1(\alpha_{(r)}) > 0$, $\forall \alpha_{(r)} \neq 0$, alors $x_{(1)}$ est un point minimal local sous contrainte.

Il faut remarquer que la matrice $L''_{xx}(x_{(1)}, \lambda_{(1)})$ n'est pas définie positive.

On détermine le caractère du point stationnaire $x_{(2)}$. On trouve $L''_{xx}(x_{(2)}, \lambda_{(2)})$:

$$L''_{xx}(x_{(2)}, \lambda_{(2)}) = \begin{bmatrix} a + 6\left(-\frac{a}{3}\right) & 0 \\ 0 & b + 6\left(-\frac{a}{3}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}$$

On établit la forme carrée $Q_2(\alpha)$:

$$\alpha L''_{xx}(x_{(2)}, \lambda_{(2)}) = (\alpha_1, \alpha_2) \begin{bmatrix} -a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix} = (-a\alpha_1, b\alpha_2),$$

$$Q_2(\alpha) = \langle (-a\alpha_1, b\alpha_2), (\alpha_1, \alpha_2) \rangle = -a\alpha_1^2 + b\alpha_2^2$$

On résout l'équation $\langle g'(x_{(2)}), \alpha \rangle = 0$:

$$3.1. \alpha_1 + 3.0. \alpha_2 = 0 \Rightarrow 3\alpha_1 = 0$$

La solution est formée par les points $\alpha_{(r)} = (0, \alpha_2)$.

On calcule les valeurs de $Q_2(\alpha_{(r)})$:

$$Q_2(\alpha_{(r)}) = b\alpha_2^2 > 0, \forall \alpha_2 \neq 0$$

Puisque $Q_2(\alpha_{(r)}) > 0$, $\forall \alpha_{(r)} \neq 0$, alors $x_{(2)}$ est un point minimal local sous contrainte.

Il faut remarquer que la matrice $L''_{xx}(x_{(2)}, \lambda_{(2)})$ n'est pas définie positive.

On détermine le caractère du point stationnaire $x_{(3)}$. On trouve $L''_{xx}(x_{(3)}, \lambda_{(3)})$:

$$L''_{xx}(x_{(3)}, \lambda_{(3)}) = \begin{bmatrix} a + 6\left(-\frac{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}{3}\right) & 0 \\ 0 & b + 6\left(-\frac{\sqrt[3]{a^3 + b^3}}{3}\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a & 0 \\ 0 & -b \end{bmatrix}$$

On établit la forme carrée $Q_3(\alpha)$:

$$\alpha L''_{xx}(x_{(3)}, \lambda_{(3)}) = (\alpha_1, \alpha_2) \begin{bmatrix} -a & 0 \\ 0 & -b \end{bmatrix} = (-a\alpha_1, -b\alpha_2),$$

$$Q_3(\alpha) = \langle (-a\alpha_1, -b\alpha_2), (\alpha_1, \alpha_2) \rangle = -a\alpha_1^2 - b\alpha_2^2 = -(a\alpha_1^2 + b\alpha_2^2)$$

Puisque $Q_2(\alpha) < 0$, $\forall \alpha \neq 0$ (et pour $\alpha_{(r)}$ – solution de l'équation $\langle g'_i(x_{(3)}), \alpha \rangle = 0$) alors $x_{(3)}$ est un point maximal local sous contrainte.

Solution. La fonction $f(x) = \frac{1}{2}ax_1^2 + \frac{1}{2}bx_2^2$, $a > 0, b > 0$ dans le domaine $X = \{x \in R^2: x_1^3 + x_2^3 = 1\}$ possède aux points $x = (1,0)$ et $x = (0,1)$ les minimums locaux sous contrainte, mais au point $x = \left(\frac{a}{\sqrt[3]{a^3+b^3}}, \frac{b}{\sqrt[3]{a^3+b^3}}\right)$ – le maximum local sous contrainte.

IV.3. Programmation quadratique

On appelle problème de programmation quadratique (PQ) le problème d'optimisation avec les caractéristiques suivantes:

- fonction économique quadratique ;
- contraintes linéaires.

Le problème (PQ) dont la fonction économique est à minimiser est de forme suivante:

$$f(x) = \sum_{j=1}^n c_j x_j + \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n d_{jk} x_j x_k \rightarrow \min$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i, i = \overline{1, m}$$

$$x_j \geq 0, j = \overline{1, n}$$

L'ensemble des solutions réalisables X est un domaine convexe, la matrice $D[d_{jk}]$ est supposée symétrique et définie non négative. De plus la fonction $f(x)$ est convexe sur X et le problème PQ est un cas particulier du problème de programmation convexe.

Pour résoudre un problème PQ on utilise les conditions nécessaires de Kuhn et Tucker, qui, à cause de la convexion du problème PQ se retrouvent suffisantes pour identifier la présence d'une solution.

On établit d'abord la fonction de Lagrange

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)$$

où $g_i(x) = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j - b_i$

Les conditions de Kuhn et Tucker nécessaires pour la résolution d'un problème PQ sont de la forme suivante :

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_j} \geq 0, j = \overline{1, n} \quad (3.1)$$

$$x_j \geq 0, j = \overline{1, n} \quad (3.2)$$

$$x_j \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_j} = 0, j = \overline{1, n} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} \leq 0, i = \overline{1, m} \quad (3.4)$$

$$\lambda_i \geq 0, i = \overline{1, m} \quad (3.5)$$

$$\lambda_i \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} = 0, i = \overline{1, m} \quad (3.6)$$

La résolution directe de ce système est très complexe. Pour cela on utilise le procédé suivant : les inéquations (3.1) et (3.4) sont transformées en équations, en introduisant deux groupes de variables supplémentaires $v_j, j = \overline{1, n}$ et $w_i, i = \overline{1, m}$, qui satisfont les conditions de non négativité. Des systèmes (3.1) - (3.6) on passe au système suivant :

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_j} - v_j = 0, j = \overline{1, n} \quad (3.7)$$

$$x_j \geq 0, v_j \geq 0, j = \overline{1, n} \quad (3.8)$$

$$x_j v_j = 0, j = \overline{1, n} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} + w_i = 0, i = \overline{1, m} \quad (3.10)$$

$$\lambda_i \geq 0, w_i \geq 0, i = \overline{1, m} \quad (3.11)$$

$$\lambda_i w_i = 0, i = \overline{1, m} \quad (3.12)$$

Le système d'équations (3.7) et (3.10) contient $(m + n)$ équations linéaires avec $2(m + n)$ inconnues. De cette manière le problème initial est équivalent au problème de recherche de la solution réalisable satisfaisant les conditions de non négativité (3.8) et (3.11), de la solution de base du système d'équations linéaires (3.7) et (3.10), satisfaisant aussi les conditions (3.9) et (3.12). Etant donné que le problème PQ est un

problème convexe d'optimisation, la solution réalisable satisfaisant toutes les contraintes est optimale.

La solution de base réalisable du système d'équations linéaires peut être trouvée à la méthode des variables artificielles utilisée en PL pour déterminer la solution de base. De plus dans les équations des systèmes (3.7) et (3.10), pour lesquelles les signes des variables supplémentaires v_j ou w_i coïncident avec les signes des termes indépendants, on ajoute des variables non négatives artificielles $Z_l, l = \overline{1, l_{max}}, l_{max} \leq m + n$, dont les signes ne coïncident pas avec les signes des termes indépendants correspondants.

Ensuite on résout le problème PL temporaire

$$F(z) = \sum_l z_l \rightarrow \min$$

sous les contraintes (3.7) - (3.12) avec ajout des variables artificielles non négatives. Pour résoudre un tel problème on utilise la méthode de Simplexe. Au cours de la résolution on doit considérer les contraintes (3.9) et (3.12). Ces contraintes signifient que x_j et v_j , λ_j et w_i ne peuvent pas être positives en même temps, c'est-à-dire que la variable x_j ne peut pas entrer en base si v_j est en base et possède une valeur positive, idem pour λ_j et w_i .

Le résultat de la résolution du problème PL temporaire peut être:

1. $\min_z F(z) = 0$, c'est-à-dire toutes les variables artificielles sont sorties de la base. La solution de base du problème PL temporaire est une solution réalisable du système (3.7) – (3.12) et, par conséquent, solution du problème PQ.

2. $\min_z F(z) > 0$, c'est-à-dire que seules les variables artificielles sont restées en base. Cela signifie que le système (3.7) – (3.12) n'a pas de solution de base réalisable et, par conséquent, le problème PQ n'a pas de solution.

Algorithme de résolution du problème PQ est le suivant :

1. Les contraintes du problème PQ sont transformées sous la forme:

$$g_i(x) \leq 0, i = \overline{1, m}$$

2. On établit la fonction de Lagrange

$$L(x, \lambda) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)$$

3. On trouve les dérivées partielles

$$\frac{\partial L}{\partial x_j}, j = \overline{1, n}; \frac{\partial L}{\partial \lambda_i}, i = \overline{1, m}$$

et construit le système (3.1) – (3.6) correspondant (conditions de Kuhn et Tucker).

4. Par introduction des variables supplémentaires $v_j, j = \overline{1, n}$ et $w_i, i = \overline{1, m}$, les inéquations

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_j} \geq 0, \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} \leq 0$$

sont transformées en équations.

$$\frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial x_j} - v_j = 0, \frac{\partial L(x, \lambda)}{\partial \lambda_i} + w_i = 0$$

comme résultat on obtient le système (3.7) – (3.12).

5. On introduit les variables artificielles z_l , on formule le problème PL temporaire à minimiser $F(z) = \sum_l z_l$ sous les contraintes (3.7) – (3.12) avec les variables artificielles non négatives introduites.

6. On résout le problème PL temporaire à l'aide de la méthode de Simplexe en considérant les contraintes (3.9) et (3.12).

Si le résultat de la résolution $\min_z F(z) = 0$, alors la solution optimale de base réalisable du PL temporaire détermine la solution x^* du problème PQ.

Si $\min_z F(z) > 0$, alors le problème PQ n'a pas de solution.

Exemple: Résoudre le problème de programmation quadratique suivant:

$$f(x) = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 6x_2 \rightarrow \min$$

$$x_1 + 2x_2 \leq 2$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

Solution

On transforme la contrainte du problème PQ sous la forme $g(x) \leq 0$:

$$g(x) = x_1 + 2x_2 - 2 \leq 0$$

On établit la fonction de Lagrange

$$L(x, \lambda) = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 4x_1 - 6x_2 + \lambda(x_1 + 2x_2 - 2)$$

On trouve les dérivées partielles et on établit le système (3.1) – (3.6) correspondant aux conditions nécessaires de Kuhn et Tucker:

$$\frac{\partial L}{\partial x_1} = 4x_1 + 2x_2 - 4 + \lambda \geq 0, x_1 \geq 0, x_1 \frac{\partial L}{\partial x_1} = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_2} = 2x_1 + 4x_2 - 6 + 2\lambda \geq 0, x_2 \geq 0, x_2 \frac{\partial L}{\partial x_2} = 0$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = x_1 + 2x_2 - 2 \leq 0, \lambda \geq 0, \lambda \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0$$

On introduit les variables supplémentaires v_1, v_2 et w transformant les inéquations en équations, comme résultat on obtient

$$4x_1 + 2x_2 - 4 + \lambda - v_1 = 0, x_1 \geq 0, v_1 \geq 0, x_1 v_1 = 0$$

$$2x_1 + 4x_2 - 6 + 2\lambda - v_2 = 0, x_2 \geq 0, v_2 \geq 0, x_2 v_2 = 0$$

$$x_1 + 2x_2 - 2 + w = 0, \lambda \geq 0, w \geq 0, \lambda w = 0$$

On a obtenu un système de trois équations linéaires à six inconnues.

On introduit respectivement dans la première et la deuxième équations les variables artificielles z_1 et z_2 :

$$4x_1 + 2x_2 - 4 + \lambda - v_1 + z_1 = 0$$

$$2x_1 + 4x_2 - 6 + 2\lambda - v_2 + z_2 = 0$$

Pour la première équation on exprime z_1 en fonction des autres variables et pour la deuxième équation – z_2 , on établit la fonction économique $F(z)$ du problème PL temporaire:

$$F(z) = z_1 + z_2 = (-4x_1 - 2x_2 + 4 - \lambda + v_1) + (-2x_1 - 4x_2 + 6 - 2\lambda + v_2)$$

$$\Leftrightarrow F(z) = 10 - 6x_1 - 6x_2 - 3\lambda + v_1 + v_2$$

On établit le problème PL temporaire:

$$F(z) = 10 - 6x_1 - 6x_2 - 3\lambda + v_1 + v_2 \rightarrow \min$$

$$4x_1 + 2x_2 + \lambda - v_1 + z_1 = 4$$

$$2x_1 + 4x_2 + 2\lambda - v_2 + z_2 = 6$$

$$x_1 + 2x_2 + w = 2$$

$$x_1, x_2, \lambda, v_1, v_2, w, z_1, z_2 \geq 0$$

On résout le problème PL temporaire à l'aide de la méthode de Simplexe. Les variables z_1, z_2 et w entrent en base. De cette manière la base $B = \{z_1, z_2, w\}$. Comme résultat on passe au tableau suivant:

			6	6	3	-1	-1	0	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	λ	v_1	v_2	w	z_1	z_2
z_1	0	4	4	2	1	-1	0	0	1	0
z_2	0	6	2	4	2	0	-1	0	0	1
w	0	2	1	2	0	0	0	1	0	0
		10	6	6	3	-1	-1	0	0	0

			6	6	3	-1	-1	0	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	λ	v_1	v_2	w	z_1	z_2
x_1	6	1	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	0	0	$\frac{1}{4}$	0
z_2	0	4	0	3	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1	0	$-\frac{1}{2}$	1
w	0	1	0	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	1	$-\frac{1}{4}$	0
		4	0	3	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1	0	$-\frac{3}{2}$	0

			6	6	3	-1	-1	0	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	λ	v_1	v_2	w	z_1	z_2
x_1	6	$\frac{2}{3}$	1	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	0	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0
z_2	0	2	0	0	2	0	-1	-2	0	1
x_2	6	$\frac{2}{3}$	0	1	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{6}$	0
		2	0	0	2	0	-1	-2	-1	0

			6	6	3	-1	-1	0	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	λ	v_1	v_2	w	z_1	z_2
x_1	6	$\frac{1}{3}$	1	0	0	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{6}$
λ	3	1	0	0	1	0	$-\frac{1}{2}$	-1	0	$\frac{1}{2}$
x_2	6	$\frac{5}{6}$	0	1	0	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{12}$
		0	0	0	0	0	0	0	-1	-1

De cette manière le problème PL temporaire est résolu.

Puisque $\min_z F(z) = 0$, alors la solution optimale de base réalisable du PL temporaire détermine la solution x^* du problème PQ. Ce qui signifie que

$$x^* = \left(x_1^* = \frac{1}{3}, x_2^* = \frac{5}{6} \right)$$

$$f^* = f(x^*) = 2 \cdot \frac{1}{9} + 2 \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{5}{6} + 2 \cdot \frac{25}{36} - 4 \cdot \frac{1}{3} - 6 \cdot \frac{5}{6} = -4 \frac{1}{6}$$

Réponse:

$$x^* = \left(\frac{1}{3}, \frac{5}{6} \right), f^* = -4 \frac{1}{6}$$

IV.4. Méthodes numériques d'optimisation des fonctions unimodales

Les fonctions **unimodales** sont des fonction possédant sur l'intervalle $\Delta = [a, b]$ un extrémum unique. En pratique on étudie les fonctions **unimodales** avec minimum car maximiser $f(x)$ revient à minimiser $-f(x)$. La propriété d'unimodalité garantit la présence de la condition essentielle de recherche du minimum x^* .

Soit $f(x)$ unimodale sur $\Delta, x_1, x_2 \in \Delta, x_1 < x_2$. Si $f(x_1) \leq f(x_2)$, alors $x^* \leq x_2$; si aussi $f(x_1) \geq f(x_2)$, alors $x^* \geq x_1$.

De cette manière, à base des valeurs calculées de la fonction $f(x)$ on peut identifier l'intervalle $\Delta' = [a', b']$, dans lequel se trouve le point x^* , et dont la longueur est inférieure à celle de l'intervalle de départ $\Delta = [a, b]$, c'est-à-dire

$L' = b' - a' < L = b - a$. On dit que le point minimal x^* est localisé sur l'intervalle $[a', b']$, de plus l'intervalle même est appelé intervalle de localisation du minimum.

En pratique on étudie les algorithmes (méthodes) de minimisation des fonctions unimodales utilisant l'information sur les valeurs de la fonction (algorithmes de rang zéro).

Pour la notation des algorithmes et la résolution des problèmes on utilise les notations suivantes:

$\Delta_i = [a_i, b_i]$ et $L_i = b_i - a_i, i = 1, 2, \dots$, – respectivement l'intervalle de localisation et sa longueur après i calculs des valeurs de $f(x)$, $\Delta_0 \equiv [a, b]$ et $L_0 = b - a$;

N – nombre de calculs des valeurs de la fonction $f(x)$.

Les données d'entrée pour la résolution d'un problème de minimisation d'une fonction unimodale sont l'intervalle initial de localisation Δ_0 et N , résultats de résolution – intervalle final de localisation Δ_N , mais aussi l'appréciation du point minimal x^* et la valeur du minimum f^* .

IV.4.1. Méthode passive de recherche du minimum

La méthode d'optimisation est dite passive quand les points $x_i, i = \overline{1, N}$, de calcul des caractéristiques du problème (pour le cas précis les valeurs de la fonction économique) sont choisis en même temps avant le début des calculs.

Si N paire, c'est-à-dire $N = 2l, l = 1, 2, \dots$, alors la meilleure (dans le sens de réduction maximale de la longueur de l'intervalle de localisation) insertion des points $x_i, i = \overline{1, N}$, est obtenue en les divisant en paires équidistantes, c'est-à-dire

$$x_{2j-1} = a + \frac{b-a}{N/2+1}j - \frac{\varepsilon}{2}, x_{2j} = a + \frac{b-a}{N/2+1}j + \frac{\varepsilon}{2}, j = \overline{1, N/2} \quad (4.1)$$

où ε – une quelconque petite valeur positive.

De plus

$$L_N = \frac{b-a}{N/2+1} + \frac{\varepsilon}{2} = \frac{L_0}{l+1} + \frac{\varepsilon}{2}$$

Si N impaire, c'est-à-dire $N = 2l + 1, l = 1, 2, \dots$, alors la meilleure est la répartition uniforme des points, c'est-à-dire

$$x_i = a + \frac{b-a}{N+1}i, i = \overline{1, N} \quad (4.2)$$

De plus

$$L_N = 2 \frac{b-a}{N+1} = \frac{L_0}{l+1}$$

Il faut remarquer que l'utilisation d'un nombre impaire des points lors de la méthode passive de recherche n'est pas effective.

Après le calcul des points $x_i, i = \overline{1, N}$, on calcule les valeurs de la fonction $f(x_i)$. Soit $f(x_k) = \min_{i=\overline{1, N}} f(x_i)$. En posant $x_0 = a, x_{N+1} = b$, on définit l'intervalle final de localisation $\Delta_N = [x_{k-1}, x_{k+1}]$. Le point x_k est choisi pour approximation (appréciation) du point minimal x^* , la valeur de la fonction $f(x_k)$ – pour l'appréciation de $f^* = f(x^*)$, c'est-à-dire

$$x^* \cong x_k, f^* \cong f(x_k)$$

Exemple. Déterminer à l'aide de la méthode passive de recherche le minimum de la fonction $f(x) = x + \frac{1}{x}$, donnée sur l'intervalle $\Delta = [0, 2]$:

- a) Pour $N = 6, \varepsilon = 0,1$;
- b) Pour $N = 7$.

Solution

- a) $N = 6, \varepsilon = 0,1$.

On définit les paires des points x_{2j-1}, x_{2j} avec la relation (4.1) :

$$x_{2j-1} = 0 + \frac{2-0}{3+1}j - \frac{0.1}{2} = 0,5j - 0,05, j = \overline{1, 3}$$

$$x_{2j} = 0 + \frac{2-0}{3+1}j + \frac{0.1}{2} = 0,5j + 0,05, j = \overline{1, 3}$$

Les résultats des calculs de x et $f(x)$ sont représentés dans le tableau :

Numéro de calcul	1	2	3	4	5	6
x	0,45	0,55	0,95	1,05	1,45	1,55

$f(x)$	2,67	2,37	2,0026	2,0024	2,14	2,20
--------	------	------	--------	--------	------	------

Puisque $f(x_4) = \min_{i=\overline{1,6}} f(x_i)$, alors on pose $\Delta_6 = [x_3, x_5] = [0,95; 1,45]$,
 $x^* \cong x_4 = 1,05, f^* \cong f(x_4) = 2,0024$

Réponse:

$$\Delta_6 = [0,95; 1,45]; x^* \cong 1,05; f^* \cong 2,0024$$

b) On détermine x_i à l'aide de la relation (4.2) :

$$x_i = 0 + \frac{2-0}{6+1}i = 0,25i, \quad i = \overline{1,7}$$

Les résultats des calculs de x et $f(x)$ sont représentés dans le tableau :

Numéro de calcul	1	2	3	4	5	6	7
x	0,25	0,5	0,75	1	1,25	1,5	1,75
$f(x)$	4,25	2,50	2,08	2,00	2,05	2,17	2,32

Puisque $f(x_4) = \min_{i=\overline{1,7}} f(x_i)$, alors on pose $\Delta_7 = [x_3, x_5] = [0,75; 1,25]$,
 $x^* \cong x_4 = 1, f^* \cong f(x_4) = 2$

Réponse:

$$\Delta_7 = [0,75; 1,25]; x^* \cong 1; f^* \cong 2$$

IV.4.2. Méthodes actives de recherche du minimum

La méthode d'optimisation est dite active quand les points $x_i, i = \overline{1, N}$, de calcul des caractéristiques du problème (pour le cas précis les valeurs de la fonction économique) sont choisis en série en considérant l'information obtenue aux étapes précédentes. Pour les méthodes actives (en série) de recherche il est recommandé de noter le numéro d'itération à l'aide d'index entre parenthèses. Par conséquent l'intervalle de localisation après j itérations sera noté $\Delta^{(j)} = [a^{(j)}, b^{(j)}]$. Si i calculs des valeurs de la fonction $f(x)$, alors $\Delta^{(j)} \equiv \Delta_i, a^{(j)} \equiv a_i, b^{(j)} \equiv b_i$.

En pratique on étudie les méthodes actives de recherche comme la méthode analogue à la dichotomie, méthode de Fibonacci et la méthode de la section dorée. Pour chacune de ces méthodes à l'itération $j, j = 1, 2, \dots$, on étudie

la paire des points $x_1^{(j)}$ et $x_2^{(j)}$, de plus $x_1^{(j)} < x_2^{(j)}$. Les valeurs de la fonction en ces points seront notées respectivement $f_1^{(j)}$ et $f_2^{(j)}$.

IV.4.2.1. Méthode analogue à la dichotomie

Pour cette méthode le nombre des calculs de $f(x)$ est paire, c'est-à-dire $N = 2l, l = 1, 2, \dots$, à l'étape j on réalise une paire de calculs $x_1^{(j)}$ et $x_2^{(j)}$ se trouvant à la distance $\frac{\varepsilon}{2}$ du milieu de l'intervalle courant de localisation $[a^{(j-1)}, b^{(j-1)}]$. Si $f_1^{(j)} \leq f_2^{(j)}$, alors on rejette la partie de l'intervalle se trouvant à droite de $x_2^{(j)}$; Si $f_1^{(j)} > f_2^{(j)}$, alors on rejette la partie de l'intervalle se trouvant à gauche de $x_1^{(j)}$.

On utilise deux critères d'arrêt des calculs:

- a) Réalisation d'un nombre donné de calculs N ;
- b) Quand la valeur donnée δ de l'intervalle de localisation est atteinte.

L'algorithme de recherche par la méthode analogue à la dichotomie est le suivant:

1. On donne N (ou δ) et ε , on pose $j = 1$.
2. A l'itération j on calcule

$$x_1^{(j)} = \frac{1}{2}(a^{(j-1)} + b^{(j-1)}) - \frac{\varepsilon}{2}, x_2^{(j)} = \frac{1}{2}(a^{(j-1)} + b^{(j-1)}) + \frac{\varepsilon}{2}$$

$$f_1^{(j)} = f(x_1^{(j)}), f_2^{(j)} = f(x_2^{(j)})$$

Si $f_1^{(j)} \leq f_2^{(j)}$, alors $a^{(j)} = a^{(j-1)}$, $b^{(j)} = x_2^{(j)}$

Si $f_1^{(j)} > f_2^{(j)}$, alors $a^{(j)} = x_1^{(j)}$, $b^{(j)} = b^{(j-1)}$

3. On vérifie le critère d'arrêt des calculs

$$\text{a) } j = \frac{N}{2} \quad \text{ou} \quad \text{b) } \frac{L_{2j}}{L_0} \leq \delta$$

Si le critère est réalisé, alors on définit l'intervalle final de localisation ; on fait l'approximation (appréciation) du point minimal x^* , de la valeur de la fonction $f(x^*)$ et les calculs s'achèvent.

Si le critère n'est pas réalisé, alors on pose $j = j + 1$ et on effectue le passage au point 2.

Exemple. Déterminer par la méthode analogue à la dichotomie le minimum de la fonction $f(x) = x^4 - 6x^2 + 10$, donnée sur l'intervalle $\Delta = [1,3]$, pour $N = 8, \varepsilon = 0,1$.

Solution

Dans ce cas on doit réaliser $\frac{N}{2} = 4$ itérations.

On note les résultats des calculs dans le tableau

Numéro d'itération	$x_1^{(j)}$	$x_2^{(j)}$	$f_1^{(j)}$	\leq $>$	$f_2^{(j)}$	$a^{(j)}$	$b^{(j)}$
0	—	—	—		—	1	3
1	1,95	2,05	1,644	\leq	2,446	1	2,05
2	1,475	1,575	1,680	$>$	1,270	1,475	2,05
3	1,713	1,813	1,004	\leq	1,082	1,475	1,813
4	1,594	1,694	1,211	$>$	1,017	1,594	1,813

Puisque $j = \frac{N}{2} = 4$ les calculs s'arrêtent.

Le point minimal est localisé sur l'intervalle $\Delta_8 = [1,594; 1,813]$. Sur cet intervalle on a étudiée quatre points:

$$\left. \begin{array}{l} a^{(4)} = 1,594 \rightarrow f(a^{(4)}) = 1,211; \\ b^{(4)} = 1,813 \rightarrow f(b^{(4)}) = 1,082; \\ x_2^{(4)} = 1,694 \rightarrow f(x_2^{(4)}) = 1,017; \\ x_1^{(3)} = 1,713 \rightarrow f(x_1^{(3)}) = 1,004; \end{array} \right\} x^* \cong x_1^{(3)} = 1,713, f^* \cong f(x_1^{(3)}) = 1,004$$

Réponse. $\Delta_8 = [1,594; 1,813], x^* \cong 1,713, f^* \cong 1,004$

IV.4.2.2. Méthode de Fibonacci

La méthode de Fibonacci est la meilleure (dans le sens de réduction maximale de l'intervalle de localisation) parmi les méthodes actives de recherche.

Par la méthode de Fibonacci, avec la première itération on calcule deux valeurs de $f(x)$ aux points $x_1^{(1)}$ et $x_2^{(1)}$ ($x_1^{(1)} < x_2^{(1)}$), disposés de façon symétrique par rapport au milieu de l'intervalle $\Delta_0 = [a, b]$. Ensuite l'une des parties de l'intervalle ($[a, x_1^{(1)}]$ ou $[x_2^{(1)}, b]$) est rejetée, de plus l'un des points (respectivement $x_2^{(1)}$ ou $x_1^{(1)}$) des calculs déjà réalisés appartient à l'intervalle

$\Delta_2 \equiv \Delta^{(1)}$. De cette manière, avec la première itération on réalise deux calculs des valeurs de la fonction $f(x)$, à chaque itération suivante – un calcul. Donc, à partir d'un nombre donné de calculs N on a à réaliser $N - 1$ itérations.

Pour le calcul de $x_1^{(j)}$ et $x_2^{(j)}$, $j = \overline{1, N-1}$, on utilise les nombres de Fibonacci, définis de la façon suivante:

$$F_0 = F_1 = 1, F_k = F_{k-1} + F_{k-2}, k = 2, 3, \dots$$

Le critère d'arrêt des calculs est la réalisation d'un nombre donné de calculs N .

L'algorithme de recherche du minimum de la fonction unimodale par la méthode de Fibonacci est le suivant:

1. On donne N , on définit les nombres de Fibonacci $F_k, k = \overline{0, N+1}$, on choisit ε par l'expression

$$\varepsilon < \frac{b-a}{F_{N+1}}$$

On pose $j = 1$

2. A l'itération j on calcule

$$\begin{aligned} x_1^{(j)} &= a^{(j-1)} + \frac{F_{N-j-1}}{F_{N-j+1}} (b^{(j-1)} - a^{(j-1)}) - \frac{(-1)^{N-j+1}}{F_{N-j+1}} \varepsilon \\ x_2^{(j)} &= a^{(j-1)} + \frac{F_{N-j}}{F_{N-j+1}} (b^{(j-1)} - a^{(j-1)}) + \frac{(-1)^{N-j+1}}{F_{N-j+1}} \varepsilon \\ f_1^{(j)} &= f(x_1^{(j)}), f_2^{(j)} = f(x_2^{(j)}) \end{aligned}$$

Si $f_1^{(j)} \leq f_2^{(j)}$, alors $a^{(j)} = a^{(j-1)}, b^{(j)} = x_2^{(j)}, x_2^{(j+1)} = x_1^{(j)}$

Si $f_1^{(j)} > f_2^{(j)}$, alors $a^{(j)} = x_1^{(j)}, b^{(j)} = b^{(j-1)}, x_1^{(j+1)} = x_2^{(j)}$

3. On vérifie le critère d'arrêt $j = N - 1$

Si le critère est réalisé, alors on détermine l'intervalle final de localisation, on fait l'appréciation de la valeur x^* et la valeur du minimum $f^* = f(x^*)$ et les calculs s'achèvent.

Si le critère n'est pas réalisé, alors on pose $j = j + 1$ et on effectue le passage au point 2.

Remarque. A l'itération j avec $j > 1$, on calcule seulement le point $x_i^{(j)}$, $i = 1, 2$, qui n'était pas déterminé à l'itération précédente.

On remarque que le point x^* est parmi les points $x_i^{(N-1)}$, $i = 1, 2$ qui sont restés à l'intérieur de l'intervalle de localisation Δ_N .

Exemple. Déterminer par la méthode de Fibonacci le minimum de la fonction $f(x) = x^4 - 6x^2 + 10$, donnée sur l'intervalle $\Delta = [1, 3]$, pour $N = 4$.

Solution

Dans ce cas on doit réaliser $N - 1 = 3$ iterations.

On détermine les nombres de Fibonacci F_k , $k = \overline{1, 5}$:

$$F_0 = F_1 = 1, F_2 = 2, F_3 = 3, F_4 = 5, F_5 = 8$$

$$\varepsilon < \frac{b - a}{F_5} = \frac{3 - 1}{8} = 0,25$$

On choisit $\varepsilon = 0,1$

Première itération

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} &= a^{(0)} + \frac{F_{N-2}}{F_N} (b^{(0)} - a^{(0)}) - \frac{(-1)^N}{F_N} \varepsilon \\ x_1^{(1)} &= 1 + \frac{2}{5} (3 - 1) - \frac{1}{5} \cdot 0,1 = 1 + \frac{2 \cdot 2 - 0,1}{5} = 1 + 0,78 = 1,78 \\ x_2^{(1)} &= a^{(0)} + \frac{F_{N-1}}{F_N} (b^{(0)} - a^{(0)}) + \frac{(-1)^N}{F_N} \varepsilon \\ x_2^{(1)} &= 1 + \frac{3}{5} (3 - 1) + \frac{1}{5} \cdot 0,1 = 1 + \frac{3 \cdot 2 + 0,1}{5} = 1 + 1,22 = 2,22 \end{aligned}$$

Deuxième itération

$$\begin{aligned} x_1^{(2)} &= a^{(1)} + \frac{F_{N-3}}{F_{N-1}} (b^{(1)} - a^{(1)}) - \frac{(-1)^{N-1}}{F_{N-1}} \varepsilon \\ x_1^{(2)} &= 1 + \frac{F_1}{F_3} (2,22 - 1) - \frac{(-1)^3}{F_3} \cdot 0,1 = 1 + \frac{1 \cdot 1,22 + 0,1}{3} = 1 + 0,44 = 1,44 \end{aligned}$$

Troisième itération

$$x_2^{(3)} = a^{(2)} + \frac{F_{N-3}}{F_{N-2}}(b^{(2)} - a^{(2)}) + \frac{(-1)^{N-2}}{F_{N-2}}\varepsilon$$

$$x_2^{(3)} = 1,44 + \frac{F_1}{F_2}(2,22 - 1,44) + \frac{(-1)^2}{F_2} \cdot 0,1 = 1,44 + \frac{1,0,78 + 0,1}{2}$$

$$x_1^{(2)} = 1,44 + 0,44 = 1,88$$

Les résultats sont notes dans le tableau:

Numéro d'itération	$x_1^{(j)}$	$x_2^{(j)}$	$f_1^{(j)}$	\leq $>$	$f_2^{(j)}$	$a^{(j)}$	$b^{(j)}$
0	—	—	—		—	1	3
1	1,78*	2,22*	1,028	\leq	4,719	1	2,22
2	1,44*	1,78	1,858	$>$	1,028	1,44	2,22
3	1,78	1,88*	1,028	\leq	1,286	1,44	1,88

Remarque: par le signe * on met en évidence les points $x_i^{(j)}$, $i = 1,2$, calculés à l'itération j .

Puisque $j = N - 1 = 3$, alors les calculs s'achèvent.

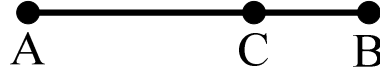
Le point minimal est localisé sur l'intervalle $\Delta_4 = [1,44; 1,88]$,

$$x^* \cong x_1^{(3)} = 1,78; f^*(x_1^{(3)}) = 1,028$$

Réponse. $\Delta_4 = [1,44; 1,88]$, $x^* \cong 1,78$, $f^* \cong 1,028$

IV.4.2.3. Méthode de la section dorée

L'inconvénient de la méthode de Fibonacci est le fait que le nombre de calculs N doit être donné. La méthode de la section dorée est aussi effective comme la méthode de Fibonacci et ne dépend pas de N . L'algorithme de recherche par la méthode de la section dorée est défini par la même règle de symétrie de la méthode de Fibonacci: avec la première itération on choisit deux points disposés de façon symétrique par rapport au milieu de l'intervalle initial; à chaque itération suivante on choisit un point symétrique au point restant. La différence réside au niveau du choix des points. La méthode de la section dorée est basée sur la division de l'intervalle de localisation « par une section dorée » c'est-à-dire cette division, quand la relation entre la grande partie de l'intervalle par rapport à tout l'intervalle est égale à la relation entre la petite par rapport à la grande.



$$\frac{AC}{AB} = \frac{CB}{AC}$$

Par cette division on utilise deux fractions de Fibonacci

$$\phi_1 = \frac{3-\sqrt{5}}{2} \cong 0,382, \phi_2 = \frac{\sqrt{5}-1}{2} \cong 0,618$$

Satisfaisant les conditions suivantes

$$\phi_1 + \phi_2 = 1, \phi_1 = (\phi_2)^2$$

Pour le cas de la méthode de la section dorée on utilise deux critères d'arrêt des calculs:

- a) La réalisation d'un nombre donné de calculs N ;
- b) Quand une valeur donnée δ de réduction de l'intervalle de localisation est atteinte.

L'algorithme de recherche du minimum d'une fonction unimodale par la méthode de la section dorée est le suivant:

1. On donne N ou δ , on pose $j = 1$
2. A l'itération j on calcule

$$\begin{aligned} x_1^{(j)} &= a^{(j-1)} + \phi_1(b^{(j-1)} - a^{(j-1)}) \\ x_2^{(j)} &= a^{(j-1)} + \phi_2(b^{(j-1)} - a^{(j-1)}) \\ f_1^{(j)} &= f(x_1^{(j)}), f_2^{(j)} = f(x_2^{(j)}) \end{aligned}$$

Si $f_1^{(j)} \leq f_2^{(j)}$, alors $a^{(j)} = a^{(j-1)}, b^{(j)} = x_2^{(j)}, x_2^{(j+1)} = x_1^{(j)}$

Si $f_1^{(j)} > f_2^{(j)}$, alors $a^{(j)} = x_1^{(j)}, b^{(j)} = b^{(j-1)}, x_1^{(j+1)} = x_2^{(j)}$

3. On vérifie le critère d'arrêt des calculs

a) $j = N - 1$ ou b) $\frac{L_{j+1}}{L_0} \leq \delta$

Si le critère est réalisé, alors on définit l'intervalle final de localisation, on fait l'appréciation du minimum x^* et de la valeur du minimum f^* et les calculs s'achèvent.

Si le critère n'est pas réalisé, alors on pose $j = j + 1$ et on passe au point 2.

Exemple. Déterminer par la méthode de la section dorée le minimum de la fonction $f(x) = x^4 - 6x^2 + 10$, donnée sur l'intervalle $\Delta = [1,3]$, pour $N = 4$.

Solution

Dans ce cas on doit réaliser $N - 1 = 3$ itérations.

Les résultats des calculs sont mentionnés dans le tableau suivant:

Numéro d'itération	$x_1^{(j)}$	$x_2^{(j)}$	$f_1^{(j)}$	$\begin{matrix} \leq \\ > \end{matrix}$	$f_2^{(j)}$	$a^{(j)}$	$b^{(j)}$
0	—	—	—		—	1	3
1	1,764*	2,236*	1,012	\leq	4,999	1	2,236
2	1,472*	1,764	1,694	$>$	1,012	1,472	2,236
3	1,764	1,944*	1,012	\leq	1,607	1,472	1,944

Puisque $j = N - 1 = 3$, alors les calculs s'achèvent.

Le point minimal est localisé sur l'intervalle $\Delta_4 = [1,472; 1,944]$,
 $x^* \cong x_1^{(3)} = 1,764$, $f^* \cong f(x_1^{(3)}) = 1,012$

Réponse: $\Delta_4 = [1,472; 1,944]$, $x^* \cong 1,764$, $f^* \cong 1,012$

IV.5. Les méthodes du gradient

Les méthodes du gradient se rapportent au groupe des méthodes de descente utilisées pour résoudre les problèmes de minimisation sans contraintes.

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$x \in R^n$$

Partant d'un point initial $x^{(0)}$, les méthodes de descente permettent d'établir une suite de points $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$, satisfaisant la condition:

$$f(x^{(k)}) < f(x^{(k-1)}), k = 1, 2, \dots \quad (5.1)$$

La suite des points $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$, se rapprochant du minimum x^* est établie suivant la règle:

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \lambda_k h^{(k)}, k = 1, 2, \dots$$

où $h^{(k)}$ – vecteur, déterminant la direction de décroissance de la fonction $f(x)$ (direction de descente) au point $x^{(k-1)}$;

λ_k – scalaire déterminant la longueur de l'intervalle le long de $h^{(k)}$.

En général le nom de la méthode de descente est définie par le choix de $h^{(k)}$, mais ses alternatives sont liées au choix de $\lambda^{(k)}$.

Les méthodes du gradient sont basées sur l'idée de substitution de la fonction à minimiser au voisinage du point $x^{(k)}$ par une partie linéaire de sa décomposition en suite de Taylor. Pour les méthodes du gradient, comme direction de descente $h^{(k)}$, on choisit l'antigradient de la fonction $f(x)$ au point $x^{(k-1)}$, c'est-à-dire

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \lambda_k f'(x^{(k-1)}), k = 1, 2, \dots$$

Les méthodes du gradient se différencient les unes des autres par les moyens de choix du paramètre λ_k . En pratique on utilise deux manières: méthode du gradient à pas variable et la méthode du gradient optimal.

IV.5.1. Méthode du gradient à pas variable

Dans le cas présent comme $h^{(k)}$ on utilise l'antigradient $(-f'(x^{(k-1)})) / \|f'(x^{(k-1)})\|$, c'est-à-dire que $x^{(k)}$ est déterminé à partir de la relation

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - \lambda_k \frac{f'(x^{(k-1)})}{\|f'(x^{(k-1)})\|}$$

La grandeur λ_k est choisie de sorte que l'expression (5.1) soit vérifiée. Le processus de choix de λ_k est réalisé de la façon suivante. On choisit les constantes $\alpha > 0$ et $0 \leq \beta \leq 1$ (souvent $\beta = \frac{1}{2}$). A l'itération k , $k = 1, 2, \dots$ on vérifie l'expression (5.1) pour $\lambda_k = \alpha$. Si elle est vérifiée, alors on réalise la division du pas, donc on pose $\lambda_k = \alpha\beta$ et de nouveau on vérifie l'expression (5.1). Le processus de division c'est-à-dire de multiplication de la

valeur courante de λ_k par β continue jusqu'à ce que la condition (5.1) soit vérifiée.

L'algorithme de résolution du problème de minimisation sans contraintes par la méthode du gradient à pas variable est le suivant:

1. On donne $\alpha, \beta, \varepsilon, x^{(0)}$; on calcule $f(x^{(0)}), f'(x^{(0)}), \|f'(x^{(0)})\|$, on pose $k = 1$.
2. On pose $\lambda_k = \alpha$
3. On calcule

$$\Delta x^{(k)} = -\lambda_k \frac{f'(x^{(k-1)})}{\|f'(x^{(k-1)})\|}, x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x^{(k)}, f(x^{(k)})$$

4. On vérifie la condition de choix de λ_k :

$$f(x^{(k)}) < f(x^{(k-1)})$$

Si la condition est vérifiée, alors on réalise le passage au point 5.

Si la condition n'est pas vérifiée, alors on pose $\lambda_k = \lambda_k \beta$ et on réalise le passage au point 3.

5. On calcule $f'(x^{(k-1)}), \|f'(x^{(k-1)})\|$
6. On vérifie le critère d'arrêt

$$\|f'(x^{(k-1)})\| \leq \varepsilon$$

Si le critère est réalisé, alors on pose $x^* \cong x^{(k)}, f^* \cong f(x^{(k)})$ et les calculs s'achèvent.

Si le critère n'est pas réalisé, alors on pose $k = k + 1$ et on réalise le passage au point 2.

Il faut remarquer qu'à côté de l'algorithme étudié, on utilise un autre algorithme pour lequel comme valeur initiale λ_k on utilise la valeur finale λ_{k-1} . De plus au point 1 de l'algorithme on ajoute λ_0 : on pose $\lambda_0 = \alpha$; au point 2 de l'algorithme on substitue λ_k par $\lambda_k = \lambda_{k-1}$.

Exemple. Résoudre, par la méthode du gradient à pas variable, le problème de minimisation sans contraintes

$$f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

pour $\alpha = 1; \beta = \frac{1}{2}; \varepsilon = 0,3; x^{(0)} = (1,0)$

Solution

On trouve les premières dérivées partielles de $f(x)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 - 4, \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = 4x_2 + 2$$

On utilise la deuxième alternative simplifiée de la méthode du gradient à pas variable. Les résultats sont notés dans le tableau suivant:

Numéro d'itération	λ	Δx_1	Δx_2	x_1	x_2	$f(x)$	$\frac{\partial f}{\partial x_1}$	$\frac{\partial f}{\partial x_2}$	$\ f'\ $
0				1	0	-3	-2	2	2,83
1	1	0,707	-0,707	1,71	-0,707	-4,32	-0,586	-0,828	1,01
2	1	0,58	0,82	2,29	0,113	-3,67			
$f(x^{(2)}) > f(x^{(1)}) \rightarrow \lambda = \alpha\beta = 0.5$									
2	0,5	0,290	0,410	2,00	-0,297	-4,42	0	0,812	0,812
3	0,5	0	-0,5	2,00	-0,797	-4,32			
$f(x^{(3)}) > f(x^{(2)}) \rightarrow \lambda = \alpha\beta = 0.25$									
3	0,25	0	-0,25	2,00	-0,547	-4,496	0	-0,188	0,188

Puisque le critère d'arrêt des calculs ($\|f'(x^{(3)})\| = 0,188 < \varepsilon = 0,3$) est réalisé, alors les calculs s'arrêtent.

Les résultats de résolution du problème de minimisation sans contraintes sont $x^* \cong x^{(3)} = (2; -0,547), f^* \cong f(x^{(3)}) = -4,496$

Réponse: $x^* \cong (2; -0,547), f^* \cong -4,496$

IV.5.2. Méthode du gradient optimal

Dans ce cas à chaque itération le pas λ_k est choisi à partir de la condition du minimum de la fonction $f(x)$ dans le sens de mouvement, c'est-à-dire

$$f(x^{(k-1)} - \lambda_k f'(x^{(k-1)})) = \min_{\lambda > 0} \varphi(\lambda)$$

où $\varphi(\lambda) = f(x^{(k-1)} - \lambda f'(x^{(k-1)}))$.

Ce moyen de choix de λ_k exige un nombre réduit d'itérations par rapport au précédent, puisque il garantit la plus petite valeur de la fonction tout au long de la direction indiquée. Dans cette alternative de la méthode du gradient à chaque itération il faut résoudre le problème de minimisation linéaire, ce qui amplifie le travail au niveau des itérations. En générale, la méthode du gradient optimal exige un nombre réduit d'itérations que la méthode du gradient à pas variable mais à chaque itération le travail est immense.

L'algorithme de résolution d'un problème de minimisation sans contraintes par la méthode du gradient optimal est le suivant:

1. On donne $\varepsilon, x^{(0)}$; on calcule $f(x^{(0)}), f'(x^{(0)}), \|f'(x^{(0)})\|$; on pose $k=1$
2. On définit λ_k
3. On calcule

$$\Delta x^{(k)} = -\lambda_k f'(x^{(k-1)}), x^{(k)} = x^{(k-1)} + \Delta x^{(k)}, f(x^{(k)}), f'(x^{(k)}), \|f'(x^{(k)})\|$$

4. On vérifie le critère d'arrêt des calculs

$$\|f'(x^{(k)})\| \leq \varepsilon$$

Si le critère est réalisé, alors on pose $x^* \cong x^{(k)}, f^* \cong f(x^{(k)})$ et les calculs s'achèvent.

Si le critère n'est pas réalisé, alors on pose $k = k + 1$ on réalise le passage au point 2.

Exemple. Résoudre, par la méthode du gradient optimal, le problème de minimisation sans contraintes suivant:

$$f(x) = x_1^2 + 2x_2^2 - 4x_1 + 2x_2 \rightarrow \min$$

pour $\varepsilon = 0,3; x^{(0)} = (1,0)$

Solution

On trouve les premières dérivées partielles de $f(x)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1 - 4, \quad \frac{\partial f}{\partial x_2} = 4x_2 + 2$$

Première itération

On définit λ_1 :

$$x_1^{(0)} - \lambda \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x_1} = 1 - \lambda(-2) = 1 + 2\lambda$$

$$x_2^{(0)} - \lambda \frac{\partial f(x^{(0)})}{\partial x_2} = 0 - \lambda \cdot 2 = -2\lambda$$

$$\varphi(\lambda) = f(x^{(0)} - \lambda f'(x^{(0)})) = (1 + 2\lambda)^2 + 2(-2\lambda)^2 - 4(1 + 2\lambda) + 2(-2\lambda)$$

$$\varphi'(\lambda) = 2(1 + 2\lambda)2 + 4(-2\lambda)(-2) - 8 + 2(-2) = 24\lambda - 8$$

$$\varphi'(\lambda) = 0 \rightarrow 24\lambda - 8 = 0 \rightarrow \lambda = \frac{1}{3}$$

Puisque $\varphi''(\lambda) = 24 > 0$, alors $\lambda = \frac{1}{3}$ est un point minimal de $\varphi(\lambda)$. Par conséquent $\lambda_1 = \frac{1}{3} = 0,333$

Deuxième itération

On définit λ_2 :

$$x_1^{(1)} - \lambda \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x_1} = 1,667 + 0,667\lambda$$

$$x_2^{(1)} - \lambda \frac{\partial f(x^{(1)})}{\partial x_2} = -0,667 + 0,667\lambda$$

$$\varphi(\lambda) = f\left(x^{(1)} - \lambda f'(x^{(1)})\right) = (1,667 + 0,667\lambda)^2 + 2(-0,667 + 0,667\lambda)^2$$

$$-4(1,667 + 0,667\lambda) + 2(-0,667 + 0,667\lambda)$$

$$\varphi'(\lambda) = 2(1,667 + 0,667\lambda)0,667 + 4(-0,667 + 0,667\lambda)0,667$$

$$-4 \cdot 0,667 + 2 \cdot 0,667 = 2,667\lambda - 0,886$$

$$\varphi'(\lambda) = 0 \rightarrow 2,667\lambda - 0,886 = 0 \rightarrow \lambda = 0,332$$

Puisque $\varphi''(\lambda) = 2,667 > 0$, alors $\lambda = 0,332$ est un point minimal de $\varphi(\lambda)$. Par conséquent $\lambda_2 = \frac{1}{3} = 0,332$

Troisième itération

On définit λ_3 :

$$x_1^{(2)} - \lambda \frac{\partial f(x^{(2)})}{\partial x_1} = 1,89 + 0,22\lambda$$

$$x_2^{(2)} - \lambda \frac{\partial f(x^{(2)})}{\partial x_2} = -0,445 - 0,22\lambda$$

$$\varphi(\lambda) = f\left(x^{(2)} - \lambda f'(x^{(2)})\right) = (1,89 + 0,22\lambda)^2 + 2(-0,445 - 0,22\lambda)^2$$

$$-4(1,89 + 0,22\lambda) + 2(-0,445 - 0,22\lambda)$$

$$\varphi'(\lambda) = 2(1,89 + 0,22\lambda)0,22 + 4(-0,445 - 0,22\lambda)(-0,22)$$

$$-4.0, -0,22 + 2. (-0,22) = 0,29\lambda - 0,0968$$

$$\varphi'(\lambda) = 0 \rightarrow 0,29\lambda - 0,0968 = 0 \rightarrow \lambda = 0,333$$

Puisque $\varphi''(\lambda) = 0,29 > 0$, alors $\lambda = 0,333$ est un point minimal de $\varphi(\lambda)$. Par conséquent $\lambda_3 = 0,333$.

On note les résultats des calculs dans le tableau:

Numéro d'itération	λ	Δx_1	Δx_2	x_1	x_2	$f(x)$	$\frac{\partial f}{\partial x_1}$	$\frac{\partial f}{\partial x_2}$	$\ f'\ $
0				1	0	-3	-2	2	2,83
1	0,333	0,667	-0,667	1,67	-0,667	-4,33	-0,667	-0,667	0,943
2	0,333	0,222	0,222	1,89	-0,445	-4,48	-0,22	0,22	0,311
3	0,333	0,074	-0,074	1,96	-0,518	-4,5	-0,074	-0,074	0,105

Puisque le critère d'arrêt des calculs est atteint ($\|f'(x^{(3)})\| = 0,105 < \varepsilon = 0,3$), alors les calculs s'achèvent.

Les résultats de résolution du problème de minimisation sans contraintes sont $x^* \cong x^{(3)} = (1,96; -0,518)$, $f^* \cong f(x^{(3)}) = -4,5$

Réponse: $x^* \cong (1,96; -0,518)$, $f^* \cong -4,5$

IV.6 Méthode de programmation approximative

La méthode de programmation approximative (MPA) se rapporte aux méthodes numériques de résolution des problèmes d'optimisation sous contraintes. Le problème de programmation approximative le plus étudié est le problème de programmation linéaire (PL).

MPA est l'une des méthodes de résolution des problèmes de programmation non linéaire. Dans ce cas le problème initial de programmation non linéaire est transformé en une suite de problèmes de programmation linéaire à l'aide des procédures de linéarisation. On analyse le problème d'optimisation sous contraintes de la forme

$$f(x) \rightarrow \min$$

$$x \in X = \{x \in R_+^n: g_i(x) \leq 0, i = \overline{1, r}\}$$

où $f(x)$, $g_i(x)$ – des fonctions non linéaires quelconques.

MPA est une méthode itérative. A l'itération k , $k = 1, 2, \dots$ on détermine le point $x^{(k)}$ – k tendance au point x^* ; De plus pour l'itération k le point initial est le point $x^{(k-1)}$. En définitif, partant du point initial donné $x^{(0)}$, on trouve la suite des point $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$ convergeant dans les conditions déterminées à la solution x^* du problème initial de programmation non linéaire. Il faut remarquer que comme point initial $x^{(0)}$ on choisit un point quelconque de l'ensemble X , c'est-à-dire que $x^{(0)} \in X$; le point $x^{(0)}$ est choisi au hasard, l'appartenance à X est déterminée par la réalisation des contraintes en ce point.

A l'itération k , $k = 1, 2, \dots$ au voisinage du point $x^{(k-1)}$ on réalise l'approximation linéaire (linéarisation) du problème de programmation non linéaire, c'est-à-dire que chaque fonction non linéaire du problème initial est remplacée par les deux premiers membres de décomposition de la suite de Taylor. En définitif on obtient un problème PL:

$$\tilde{f}(x) = f(x^{(k-1)}) + \langle f'(x^{(k-1)}), (x - x^{(k-1)}) \rangle \rightarrow \min$$

$$\tilde{g}_i(x) = g_i(x^{(k-1)}) + \langle g'_i(x^{(k-1)}), (x - x^{(k-1)}) \rangle \leq 0, i = \overline{1, r}, x \in R_+^n$$

Ensuite on trouve la solution $x^{(0)}$ du problème PL et on détermine le point $x^{(k)}$ à partir des points connus $x^{(k-1)}$ et $x^{(0)}$. Ce point doit vérifier l'expression

$$\begin{aligned} x^{(k)} &\in X \\ f(x^{(k)}) &< f(x^{(k-1)}) \end{aligned} \tag{6.1}$$

Il existe plusieurs façons de de déterminer $x^{(k)}$. En pratique $x^{(k)}$ est déterminé à l'aide de la relation

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \lambda_k (x^0 - x^{(k-1)}), 0 \leq \lambda_k \leq 1, k = 1, 2, \dots$$

où λ_k – paramètre (scalaire), déterminant la longueur de l'intervalle à partir du point $x^{(k-1)}$ en direction du point x^0 .

On peut remarquer que pour $\lambda_k = 1$ la condition $x^{(k)} = x^0$ doit être vérifiée pour $\lambda_k = 0$; $x^{(k)} = x^{(k-1)}$.

La valeur λ_k est choisie de sorte que soit vérifiée l'expression (6.1). Le processus de choix du pas (intervalle) vérifiant ces conditions est identique au

même processus pour la méthode du gradient à pas variable. On choisit la constante $0 < \beta < 1$ (dans ce cas $\alpha = 1$). A l'itération k , $k = 1, 2, \dots$ on vérifie la réalisation des conditions (6.1) pour $\lambda_k = 1$, c'est-à-dire pour $x^{(k)} = x^0$. Si les conditions ne sont pas réalisées, alors on effectue la division du pas. On pose $\lambda_k = \beta$ et on vérifie de nouveau la réalisation des conditions (6.1). Le processus de division c'est-à-dire de multiplication de la valeur courante λ_k avec β , continue jusqu'à ce que les conditions (6.1) soient réalisées.

L'algorithme de résolution du problème de minimisation sous contraintes par la méthode de programmation approximative comprend les étapes suivantes:

1. On donne $\beta, \delta_1, \delta_2$; on choisit $x^{(0)}$; on pose $k = 1$.
2. On réalise la linéarisation du problème initial au voisinage du point $x^{(k-1)}$. En définitif on obtient le problème PL.
3. On trouve la solution $x^{(0)}$ du problème PL.
4. On pose $\lambda_k = 1$.
5. On calcule $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \lambda_k(x^0 - x^{(k-1)})$.
6. On vérifie les conditions de choix de $x^{(k)}$:

$$\begin{aligned} g_i(x^{(k)}) &\leq 0, i = \overline{1, r} \\ f(x^{(k)}) &< f(x^{(k-1)}) \end{aligned}$$

Si les conditions sont réalisées, alors on effectue le passage au point 7.

Si les conditions ne sont pas réalisées, alors on pose $\lambda_k = \lambda_k \beta$ et on effectue le passage au point 5.

7. On vérifie les critères d'arrêt

$$\begin{aligned} \frac{|f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})|}{|f(x^{(k-1)})|} &\leq \delta_1 \\ \frac{|x_j^{(k)} - x_j^{(k-1)}|}{|x_j^{(k-1)}|} &\leq \delta_2, j = \overline{1, n} \end{aligned}$$

Si ces critères sont réalisés, alors on pose $x^* \cong x^{(k)}$, $f^* \cong f(x^{(k)})$ et les calculs s'achèvent.

Si ces critères ne sont pas réalisés, alors on pose $k = k + 1$ et on réalise le passage au point 2.

Exemple. Résoudre, par la méthode de programmation approximative, le problème de minimisation sous contraintes:

$$\begin{aligned}
f(x) &= 4x_1 - x_2^2 - 12 \rightarrow \min \\
x_1^2 + x_2^2 &\leq 25 \\
10x_1 - x_1^2 + 10x_2 - x_2^2 &\geq 34 \\
x_1 &\geq 0, x_2 \geq 0
\end{aligned}$$

pour $\beta = 0,7; \delta_1 = 0,1; \delta_2 = 0,3$.

Solution.

On transforme les contraintes du problème de départ sous la forme $g_i(x) \leq 0$:

$$g_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 25 \leq 0$$

$$g_2(x) = x_1^2 - 10x_1 + x_2^2 - 10x_2 + 34 \leq 0$$

On trouve $f'(x), g_1'(x), g_2'(x)$:

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 4; \frac{\partial f}{\partial x_2} = -2x_2 \rightarrow f'(x) = (4; -2x_2);$$

$$\frac{\partial g_1}{\partial x_1} = 2x_1; \frac{\partial g_1}{\partial x_2} = 2x_2 \rightarrow g_1'(x) = (2x_1, 2x_2);$$

$$\frac{\partial g_2}{\partial x_1} = 2x_1 - 10; \frac{\partial g_2}{\partial x_2} = 2x_2 - 10 \rightarrow g_2'(x) = (2x_1 - 10, 2x_2 - 10);$$

On choisit $x^{(0)} = (2; 4)$.

On vérifie l'appartenance du point $x^{(0)}$ au domaine réalisable X :

$$g_1(x^{(0)}) = 2^2 + 4^2 - 25 = -5 < 0$$

$$g_2(x^{(0)}) = 2^2 - 10 \cdot 2 + 4^2 - 10 \cdot 4 + 34 = -6 < 0$$

$$x_1^{(0)} > 0, x_2^{(0)} > 0$$

Puisque les contraintes sont réalisées, alors le point $x^{(0)} = (2; 4)$ est un point réalisable, c'est-à-dire $x^{(0)} \in X$.

Première itération

On réalise la linéarisation du problème initial au voisinage du point $x^{(0)}$:

$$f(x^{(0)}) = 4.2 - 4^2 - 12 = 8 - 16 - 12 = -20$$

$$f'(x^{(0)}) = (4; -2.4) = (4; -8)$$

$$\begin{aligned}\tilde{f}(x) &= -20 + \langle (4; -8), (x_1 - 2; x_2 - 4) \rangle \\ &= -20 + 4(x_1 - 2) - 8(x_2 - 4) = 4x_1 - 8x_2 + 4;\end{aligned}$$

$$g'_1(x^{(0)}) = (2.2; 2.4) = (4; 8)$$

$$\begin{aligned}\tilde{g}_1(x) &= -5 + \langle (4; 8), (x_1 - 2; x_2 - 4) \rangle \\ &= -5 + 4(x_1 - 2) + 8(x_2 - 4) = 4x_1 + 8x_2 - 45\end{aligned}$$

$$g'_2(x^{(0)}) = (2.2 - 10; 2.4 - 10) = (-6; -2)$$

$$\begin{aligned}\tilde{g}_2(x) &= -6 + \langle (-6; -2), (x_1 - 2; x_2 - 4) \rangle \\ &= -6 - 6(x_1 - 2) - 2(x_2 - 4) = -6x_1 - 2x_2 + 14\end{aligned}$$

On établit le problème PL :

$$\begin{aligned}\tilde{f}(x) &\rightarrow \min \\ \tilde{g}_1(x) &\leq 0 \\ \tilde{g}_2(x) &\leq 0 \\ x_1 &\geq 0, x_2 \geq 0\end{aligned}$$

On substitue $\tilde{f}(x), \tilde{g}_1(x), \tilde{g}_2(x)$:

$$\tilde{f}(x) = 4x_1 - 8x_2 + 4 \rightarrow \min$$

$$4x_1 + 8x_2 \leq 45 \quad (1)$$

$$6x_1 + 2x_2 \geq 14 \quad (2)$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

Première phase :

En introduisant la variable artificielle le PL se formule sous la forme équivalente suivante :

$$\max(z) = -v_2$$

$$4x_1 + 8x_2 + t_1 = 45$$

$$6x_1 + 2x_2 - t_2 + v_2 = 14$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

			0	0	0	0	-1
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2	v_2
t_1	0	45	4	8	1	0	0
v_2	-1	14	6	2	0	-1	1
		-14	6	2	0	-1	0

			0	0	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2
t_1	0	$\frac{107}{3}$	0	$\frac{20}{3}$	1	$\frac{2}{3}$
x_1	0	$\frac{7}{3}$	1	$\frac{1}{3}$	0	$-\frac{1}{6}$
		0	0	0	0	0

La solution de base réalisable est donc $(x_1, x_2, t_1, t_2) = \left(\frac{7}{3}; 0; \frac{107}{3}; 0\right)$

Deuxième phase :

Le PL se formule sous la forme équivalente suivante:

$$\min(z) = 4x_1 - 8x_2 + 4$$

$$0x_1 + \frac{20}{3}x_2 + t_1 + \frac{2}{3}t_2 = \frac{107}{3}$$

$$x_1 + \frac{1}{3}x_2 + 0t_1 + \frac{-1}{6}t_2 = \frac{7}{3}$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, t_1 \geq 0, t_2 \geq 0$$

			-4	8	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2
t_1	0	$\frac{107}{3}$	0	$\frac{20}{3}$	1	$\frac{2}{3}$

x_1	-4	$\frac{7}{3}$	1	$\frac{1}{3}$	0	$-\frac{1}{6}$
		$\frac{40}{3}$	0	$\frac{28}{3}$	0	$-\frac{2}{3}$

			-4	8	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2
x_2	8	$\frac{107}{20}$	0	1	$\frac{3}{20}$	$\frac{1}{10}$
x_1	-4	$\frac{11}{20}$	1	0	$-\frac{1}{20}$	$-\frac{1}{5}$
		$-\frac{183}{5}$	0	0	$-\frac{7}{5}$	$-\frac{8}{5}$

La solution du problème est le point $x^0 = (0,55; 5,35)$

On pose $\lambda_1 = 1$. On calcule $x^{(1)}$:

$$x^{(1)} = x^{(0)} + \lambda_1(x^0 - x^{(0)})$$

On vérifie les conditions de choix $x^{(1)}$:

$$g_1(x^{(1)}) = 0,55^2 + 5,35^2 - 25 = 3,9 > 0$$

Puisque les conditions ne sont pas réalisées, alors on pose $\lambda_1 = \lambda_1\beta = 0,7$. On calcule $x^{(1)}$:

$$x^{(1)} = (2; 4) + 0,7(0,55 - 2; 5,35 - 4) = (2; 4) + (-1,015; 0,945) = (0,985; 4,945)$$

On vérifie les conditions de choix de $x^{(1)}$:

$$g_1(x^{(1)}) = 0,985^2 + 4,945^2 - 25 = 0,423 > 0$$

Puisque les conditions ne sont pas réalisées, alors on pose $\lambda_1 = \lambda_1\beta = 0,49$. On calcule $x^{(1)}$:

$$x^{(1)} = (2; 4) + 0,49(-1,45; 1,35) = (2; 4) + (-0,71; 0,66) = (1,29; 4,66)$$

On vérifie les conditions de choix de $x^{(1)}$:

$$g_2(x^{(1)}) = 1,29^2 - 10.1,29 + 4,66^2 - 10.4,66 + 34 = -2,12 < 0$$

$$x_1^{(1)} > 0, x_2^{(1)} > 0$$

$$f(x^{(1)}) = 4.1,29 - 4,66^2 - 12 = -28,56 < f(x^{(0)}) = -20$$

Puisque les conditions sont réalisées, alors:

$$x^{(1)} = (1,29; 4,66)$$

On vérifie le critère d'arrêt des calculs:

$$\frac{|f(x^{(1)}) - f(x^{(0)})|}{|f(x^{(0)})|} = \frac{|-28,56 + 20|}{|-20|} = 0,428 > \delta_1 = 0,1$$

Puisque le critère n'est pas réalisé alors on passe à l'étape 2.

Deuxième étape (deuxième itération)

On réalise la linéarisation du problème initial au voisinage du point $x^{(1)}$:

$$f'(x^{(1)}) = (4; -2.4,66) = (4; -9,32)$$

$$\begin{aligned} \tilde{f}(x) &= -28,56 + \langle (4; -9,32), (x_1 - 1,29; x_2 - 4,66) \rangle \\ &= -28,56 + 4(x_1 - 1,29) - 9,32(x_2 - 4,66) = 4x_1 - 9,32x_2 + 9,71; \end{aligned}$$

$$g'_1(x^{(1)}) = (2.1,29; 2.4,66) = (2,58; 9,32)$$

$$\begin{aligned} \tilde{g}_1(x) &= -1,62 + \langle (2,58; 9,32), (x_1 - 1,29; x_2 - 4,66) \rangle \\ &= -1,62 + 2,58(x_1 - 1,29) + 9,32(x_2 - 4,66) = 2,58x_1 + 9,32x_2 - 48,4 \end{aligned}$$

$$g'_2(x^{(1)}) = (2.1,29 - 10; 2.4,66 - 10) = (-7,42; -0,68)$$

$$\begin{aligned} \tilde{g}_2(x) &= -2,12 + \langle (-7,42; -0,68), (x_1 - 1,29; x_2 - 4,66) \rangle \\ &\quad -7,42x_1 - 0,68x_2 + 10,62 \end{aligned}$$

On établit le problème PL :

$$\begin{aligned} \tilde{f}(x) &\rightarrow \min \\ \tilde{g}_1(x) &\leq 0 \\ \tilde{g}_2(x) &\leq 0 \\ x_1 &\geq 0, x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

On substitue $\tilde{f}(x)$, $\tilde{g}_1(x)$, $\tilde{g}_2(x)$:

$$\tilde{f}(x) = 4x_1 - 9,32x_2 + 9,71 \rightarrow \min$$

$$2,58x_1 + 9,32x_2 \leq 48,4 \quad (1)$$

$$7,42x_1 + 0,68x_2 \geq 10,6 \quad (2)$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

Première phase :

En introduisant la variable artificielle le PL se formule sous la forme équivalente suivante :

$$\max(z) = -v_2$$

$$2,58x_1 + 9,32x_2 + t_1 = 48,4$$

$$7,42x_1 + 0,68x_2 - t_2 + v_2 = 10,6$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0$$

			0	0	0	0	-1
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2	v_2
t_1	0	48,4	2,58	9,32	1	0	0
v_2	-1	10,6	7,42	0,68	0	-1	1
		-10,6	4,42	0,68	0	-1	0

			0	0	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2
t_1	0	44,713	0	9,083	1	0,348
x_1	0	1,429	1	0,092	0	-0,135
		0	0	0	0	0

La solution de base réalisable est donc $(x_1, x_2, t_1, t_2) = (1,429; 0; 44,713; 0)$

Deuxième phase :

Le PL se formule sous la forme équivalente suivante:

$$\min(z) = 4x_1 - 9,32x_2 + 9,71$$

$$0x_1 + 9,083x_2 + t_1 + 0,348t_2 = 44,713$$

$$x_1 + 0,092x_2 + 0t_1 - 0,135t_2 = 1,429$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, t_1 \geq 0, t_2 \geq 0$$

			-4	9,32	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2
t_1	0	44,713	0	9,083	1	0,348
x_1	-4	1,429	1	0,092	0	-0,135
		15,426	0	9,688	0	-0,54

			-4	9,32	0	0
Base	C	B	x_1	x_2	t_1	t_2
x_2	9,32	4,923	0	1	0,11	0,038
x_1	-4	0,976	1	0	-0,01	-0,138
		-32,268	0	0	-1,065	-0,906

La solution du problème est le point $x^0 = (0,976; 4,92)$

On vérifie les conditions de choix $x^{(2)}$:

$$g_1(x^{(2)}) = 0,976^2 + 4,92^2 - 25 = 0,159 > 0$$

Puisque les conditions ne sont pas réalisées, alors on pose $\lambda_2 = \lambda_2\beta = 0,7$. On calcule $x^{(2)}$:

$$\begin{aligned} x^{(2)} &= (1,29; 4,66) + 0,7(0,976 - 1,2; 4,92 - 4,66) = (1,29; 4,66) + (-0,157; 0,182) \\ &= (1,13; 4,84) \end{aligned}$$

On vérifie les conditions de choix de $x^{(2)}$:

$$g_1(x^{(2)}) = 1,13^2 + 4,84^2 - 25 = -0,297 < 0$$

$$g_2(x^{(2)}) = 1,13^2 - 10.1,13 + 4,84^2 - 10.4,84 + 34 = -0,998 < 0$$

$$x_1^{(2)} > 0, x_2^{(2)} > 0$$

$$f(x^{(2)}) = 4.1,13 - 4,84^2 - 12 = -30,906 < f(x^{(1)}) = -28,56$$

Puisque les conditions sont réalisées, alors:

$$x^{(2)} = (1,13; 4,84)$$

On vérifie les critères d'arrêt des calculs:

$$\frac{|f(x^{(2)}) - f(x^{(1)})|}{|f(x^{(1)})|} = \frac{|-30,906 + 28,56|}{|-28,56|} = 0,082 < \delta_1 = 0,1$$

$$\frac{|x_1^{(2)} - x_1^{(1)}|}{|x_1^{(1)}|} = \frac{|1,13 - 1,29|}{|1,29|} = 0,124 < \delta_2 = 0,3$$

$$\frac{|x_2^{(2)} - x_2^{(1)}|}{|x_2^{(1)}|} = \frac{|4,84 - 4,66|}{|4,66|} = 0,039 < \delta_2 = 0,3$$

Puisque les critères sont réalisés alors on pose $x^* \cong x^{(2)} = (1,13; 4,84)$; $f^* = f(x^{(2)}) = -30,906$ et les calculs s'achèvent.

Réponse : $x^* \cong (1,13; 4,84)$, $f^* = -30,906$

V. L'ANALYSE DE LA RELATION ENTRE DEUX VARIABLES

V. 0. La corrélation et la régression courbes

Souvent la relation entre les variables est loin d'être linéaire ce qui pose deux problèmes:

- 1) Comment déterminer le modèle de la relation?
- 2) Quelle méthode utiliser pour analyser la corrélation et la régression de type courbe?

Dans ce chapitre on s'intéressera d'abord aux grandes familles de courbes, au choix du modèle à adopter ensuite, enfin on abordera la transformation linéaire des courbes les plus utilisées.

V.1. Les grands types de modèles et de courbes

On va présenter les modèles les plus utilisés: linéaire, puissance, exponentiel, Pareto, Gibrat et logistique.

V.1.1. Le modèle linéaire : *le rapport proportionnel*

C'est une droite d'équation $y = ax + b$ qui exprime la quantité de variation de y lorsque x varie d'une unité alors que b est la valeur de y lorsque $x = 0$. Le modèle linéaire exprime un rapport d'évolution proportionnel entre deux variables x et y dans un rapport de 1 à a .

V.1.2. Le modèle puissance : le rapport relatif constant ou le lien allométrique

Le modèle puissance exprime une relation allométrique de la forme $y = b \cdot x^a$ donnant graphiquement une courbe convexe lorsque $a < 1$, concave lorsque $a > 1$ ou en i quand $a < 0$. La puissance (a) indique de combien varie y en % (augmente ou diminue selon le signe de a) lorsque x augmente de 1%. C'est le processus d'allométrie (en biologie) et d'élasticité (en économie), lorsque deux phénomènes se trouvent liés par un rapport constant qui assure l'équilibre de l'ensemble et exprime une loi de répartition interne dans un système donné. C'est le cas des systèmes organisés comme l'organisme humain ou animal où, à part les cas de maladie ou de déformation, chaque organe croît selon un rythme fixe qui garantit l'équilibre général du corps indépendamment de la quantité concernée. C'est la loi qui régit aussi l'économie où certains agrégats comme l'épargne, l'investissement ou la consommation sont en rapport fixe avec le revenu pour une certaine période. Un des objectifs des enquêtes de consommation qu'effectue l'INS est de déterminer ces paramètres de base et de pouvoir détecter les tendances de changement des structures socio-économiques: si le revenu d'un individu augmentait de 10% de combien augmenterait sa consommation (alimentaire, de loisirs, de culture, de viande...), son épargne (logement, globale...)? C'est ce qu'on appelle en économie *l'élasticité*. En géographie, la plupart des phénomènes se trouvent concernés par ce type de rapport qui expriment la diffusion dont le rythme varie au cours du temps ou dans l'espace vers l'accélération ($a > 1$) ou la décélération ($a < 1$) passant ainsi par plusieurs stades différents exprimant la naissance, la diffusion et la généralisation enfin la saturation, voire le repli et la contraction. C'est très rare qu'on observe un rapport absolu proportionnel fixe comme le laisse voir le modèle linéaire. Le modèle puissance ou allométrique exprime plutôt un taux de croissance proportionnel ou un rapport relatif proportionnel fixe. C'est le cas par exemple de la relation entre la superficie et la taille d'une ville.

V.1.2. 1. Le modèle exponentiel : l'évolution à un taux constant ou en accélération

Le modèle exponentiel matérialise une relation de la forme $y = b \cdot e^{ax}$ ou $y = b \cdot 10^{ax}$. Il s'exprime par une courbe en J ($a > 1$) ou en i ($a < 0$) qui présente une analogie parfois trompeuse avec le modèle puissance. Il représente une évolution (croissance ou décroissance) à un taux constant ou en accélération. C'est le cas d'une expansion économique, du processus des

générations spontanées, la multiplication des cellules, le dépeuplement d'une région.

V.1.2. 2. Le modèle logistique: l'évolution proportionnelle à un potentiel avec limite

Le modèle logistique exprime la croissance proportionnelle au développement potentiel possible ($L - y$). La limite L (Le passage du modèle à limite relative à un modèle à limite absolue se fait en prenant $1/y$) peut être absolue: $Y = L - e^{-(ax+b)}$ ou relative: $Y = L/[1 + e^{-(ax+b)}]$. C'est une courbe en S asymptotique à l'axe de la limite (absolue) ou à deux axes (la limite et l'axe des x) qui caractérise les processus de diffusion des phénomènes dans le temps ou l'espace, c'est le cas de la loi de Mitscherlich en fumure ou la loi de Compertz. Elle exprime la diffusion de nombreux faits dans le temps et l'espace comme l'urbanisation en Tunisie ou le Monde, la Télévision, le Téléphone portable ou même une mode...

V.1.2. 3. Le modèle de Pareto : la loi des inégalités et la distribution hiérarchique

La loi de Pareto exprime les inégalités socioéconomiques et d'une manière générale les processus hiérarchiques où l'effectif d'une population dépassant une valeur donnée diminue au fur et à mesure que cette valeur augmente. C'est le cas des distributions de tous les phénomènes selon la taille (les exploitants selon la taille, la population selon le revenu, les villes selon la taille, les pays selon le PIB...). Le modèle s'écrit comme suit: $N_x = kx^{-a}$ avec N_x : l'effectif cumulé des observations ayant une valeur inférieure à un seuil donné ($x \geq x_i$).

V.1.3. La loi de Gibrat : la loi de l'effet proportionnel

Une série de causes indépendantes à effets petits, égaux et proportionnels à la grandeur du phénomène conduit à une dissymétrie à droite et à une courbe log-normale. $y = a \log x + b$. C'est le cas des distributions de revenus, des fortunes ou de l'effet de taille... Tout se fait dans un système comme si les phénomènes croissent proportionnellement à leur taille.

V.1.4. Le modèle polynomial

Il s'exprime par une courbe complexe avec plusieurs creux et bosses de la forme $y = a_1x^n + a_2x^{n-1} + \dots + b$. Les plus simples étant le modèle parabolique, cubique et quadratique.

Dans le modèle parabolique, la courbe se présente sous la forme $y = ax^2 + bx + c$ avec un maximum ou un minimum au milieu selon le signe de a . Il correspond aux processus qui passent au cours de l'évolution par un extrémum et reviennent: c'est le cas par exemple de la nébulosité dans un climat méditerranéen à deux saisons prononcées ou de la mortalité selon l'âge qui est élevée au début, baisse progressivement pour atteindre un minimum autour de 20-23 ans pour commencer à augmenter de nouveau ...

Il existe d'autres modèles de distributions d'utilisation très limitée à certains cas particuliers d'analyse. Il est impératif de connaître, dans tous les cas, le fondement théorique de chaque modèle pour pouvoir choisir le type approprié aux données et à la nature du problème posé et bien interpréter les observations.

V.2. Le choix du modèle et de la courbe

Avant de procéder aux calculs, il faut bien choisir le modèle de relation à adopter si on ne veut pas passer à côté du problème et tirer des conclusions sur l'absence de lien là où il peut être très fort pour la simple raison qu'on a mal choisi le type de courbe.

Le choix du type de courbe doit s'appuyer sur certaines règles-étapes: la connaissance théorique préalable du phénomène étudié, le nuage de points, enfin l'intensité de la corrélation.

1. La connaissance théorique préalable du phénomène étudié: Parfois, on connaît déjà la loi de distribution du phénomène (une distribution normale, exponentielle ou de puissance...) et on adopte le modèle correspondant. On sait très bien que la granulométrie suit la loi de Gauss, que plusieurs phénomènes en géographie ou économie suivent le modèle puissance comme la relation entre la taille et la superficie d'une ville, que les phénomènes de diffusion suivent un modèle logistique...

A défaut d'une théorie, la connaissance du terrain peut s'avérer utile et aider à choisir le modèle de distribution d'un phénomène donné. En étudiant la motorisation à Tunis en 1977 par exemple, on a découvert que la possession de la voiture commençait réellement vers un revenu du ménage de 140 dinars. Ce seuil n'a pas de fondement théorique mais était le fruit de la connaissance du terrain. Sa connaissance on a permis de corriger la partition en classes des revenus des ménages et de ne pas aboutir à une impasse.

Mais il faut être prudent aussi et vérifier le nuage de points avant de procéder au traitement.

2. La représentation graphique

Le nuage de points permet dans pas mal de cas de voir à quel type de courbe on a affaire. Trois cas se présentent:

- a) *L'indépendance*: L'indépendance s'exprime graphiquement par un nuage de points sous la forme d'un alignement parallèle à l'un des axes, d'une trame circulaire ou elliptique.
- b) *La liaison fonctionnelle*: Une liaison fonctionnelle se manifeste par un alignement systématique de tous les points suivant une courbe donnée. La connaissance de x permet ainsi de déterminer avec précision la valeur de y . On note la relation: $y = f(x)$ où y est fonction de x .
- c) *La dépendance*: La dépendance est la situation la plus fréquente dans les sciences sociales qui exprime la présence d'une relation plus ou moins forte entre deux variables de la forme $y = f(x) \pm \varepsilon$ laissant la part à l'aléatoire et autres facteurs non pris en compte. Graphiquement, la dépendance s'exprime par un nuage de points sous forme d'une courbe donnée. La connaissance théorique des grandes familles de courbes permet d'en choisir la plus appropriée pour ajuster le nuage de points. On adopte toujours la courbe la plus proche du nuage de points.

3. La plus forte corrélation (r max)

Si le nuage de points ne permet pas de trancher en faveur d'un modèle donné, on calcule le coefficient de corrélation des 2 ou 3 modèles les plus proches du nuage obtenu et on adopte celui qui a le coefficient le plus élevé sous réserve d'essayer de trouver la justification du modèle choisi. En effet, à une situation donnée on peut toujours trouver un modèle voire plusieurs qui expliquent le maximum de variance mais il faut toujours justifier le choix d'un modèle et adopter celui qui offre une explication raisonnable même si sa variance expliquée est plus réduite.

Exemple: Dans le cas de la relation entre fécondité et planning familial on peut trouver un modèle polynomial ou exponentiel qui expliquent chacun 99% de la variance mais quelle serait l'explication de tels modèles? La question n'est pas tant de trouver un modèle et n'importe lequel que de trouver une explication logique et acceptable.

Région	Fécondité % (F)	Planning Familial P % des femmes utilisant le PF
Tunis	133.1	39.3
Sfax	137.4	33.1
Sahel	148.1	28.2
Nord-Est	137.3	32.6
Nord-Ouest	139.1	28.7
Centre-Ouest	192.8	11.4
Sud	183.2	15.9

L'examen du nuage de points montre qu'on peut utiliser un des trois modèles suivants avec une explication allant de 97 à 99% :

- Régression linéaire: elle explique 97% : $F = -2.392636P + 217.6695343$
- Régression parabolique: elle explique 99%: $F = 0.0652x^2 - 5.5902x + 250.9943$
- Régression exponentielle: elle explique 99%: $F = 226.3298 \cdot 10^{-0.0065P}$

Dans ce cas, il ne suffit pas de trouver un modèle qui explique le maximum de variance (on en trouve toujours) mais il s'agit d'expliquer le phénomène avec un fondement théorique à l'appui à la fois raisonnable et irréfutable.

V.3. La linéarisation

Une fois, on a choisi le modèle à adopter, on doit transformer la courbe en une relation linéaire, plus facile à étudier de la forme $y = ax + b$. Une fois les données linéarisées, on applique systématiquement la méthode de la corrélation et de la régression.

Il existe plusieurs méthodes de linéarisation dont on peut citer certaines comme la racine (carrée ou autre) et les fonctions trigonométriques (sin, cos, tg et cotg...) mais on se limitera ici à la *transformation logarithmique* qui est la plus simple et la plus utilisée. Dans tous les cas, il faut adopter la transformation la plus appropriée aux données tout en gardant un minimum de visibilité des données.

1. Le logarithme

- a) Définition: Le logarithme (a) d'une valeur x en fonction d'une base (b) est la valeur (a) à laquelle on élève la base (b) pour obtenir la valeur initiale x :

$$\log_b x = a \Leftrightarrow b^a = x$$

Ainsi $\log_{10} 10 = 1$ d'où $10^1 = 10$ et $\log_{10} 100 = 2$ d'où $10^2 = 100$..

b) *La base*: On peut utiliser n'importe quel chiffre comme base (8, 17, 2, 10,...) mais les bases plus utilisées sont 10 et $e = 2.718$ d'où *le logarithme décimal* (note \log) et *le logarithme naturel* ou *népérien* (noté \ln). Dans la suite du texte on écrira seulement $\log x$ et $\ln x$

c) *Les règles de base du logarithme* : elles sont au nombre de quatre règles qu'on va utiliser pour transformer une courbe en une ligne droite:

- Le logarithme de la base en fonction de la même base est toujours égal à l'unité: $\log_{10} 10 = 1$ et $\log_e e = 1$
- Le logarithme d'un produit est égal à la somme des logarithmes:

$$\log(a.b) = \log a + \log b$$

- Le logarithme d'un quotient est égal à la différence des logarithmes:

$$\log(a/b) = \log a - \log b$$

- Le logarithme d'une puissance (x^a) est égal à la puissance (a) multipliée par le logarithme de ce nombre (x): $\log x^a = a. \log x$.

2. La transformation logarithmique

En utilisant le logarithme on arrive à transformer la plupart des relations courbes en des relations linéaires plus simples de la forme $y = ax + b$.

a) *Le modèle puissance*

En utilisant les règles précédentes on transforme la relation $y = bx^a$ en une relation linéaire: $\log y = a. \log x + \log b$.

Si on pose y' , x' et b' comme le logarithme de y , x et b on obtient $y' = ax' + b'$. Tout revient à travailler sur les logarithmes des observations (y' et x') au lieu des valeurs réelles. Une fois, on a obtenu b' , il y a lieu de calculer b : $b = 10^{b'}$

Exemple: La loi rang-taille de Zipf qui s'écrit: $Pr = br^{-a}$ devient après transformation logarithmique une relation linéaire de la forme: $\log Pr = -a \log r + \log b$. (Cf. les travaux de A Belhedi 1992, 1998, 2000, 2004)

b) Le modèle exponentiel

La relation $y = b.e^{ax}$ devient $\ln y = ax + \ln b$. On peut écrire alors: $y' = ax + b'$. Il s'agit de transformer les valeurs y en logarithmes mais pas celles de x . Une fois, on a trouvé b' , on calcule $b = e^{b'}$.

On peut utiliser aussi le modèle $y = b.10^{ax}$ donnant $y' = ax + b'$ avec $b = 10^{b'}$. Les deux relations sont équivalentes, la première utilise le logarithme naturel, la seconde utilise plutôt le logarithme décimal, les paramètres b ne sont pas équivalents puisque la base est différente, mais le résultat final est le même.

c) Le modèle logistique

La relation $y = L/[1 + e^{-(ax+b)}]$ devient alors $\ln \left[\frac{y}{1-y} \right] = ax + b$ et on obtient: $y' = ax + b$ avec $y' = y/(1 - y)$. On peut utiliser aussi le logarithme décimal.

d) La Loi de Pareto

On a $N_x = k.x^{-a}$ ce qui donne $\ln N_x = -a \ln x + \ln k$. On a ainsi $y' = -ax' + k'$ avec $y' = \ln N_x$, $x' = \ln x$, $k' = \ln k$, $k = 10^{k'}$. On peut aussi utiliser le logarithme décimal.

On voit qu'on peut transformer facilement n'importe quelle courbe en une relation linéaire de la forme $y = ax + b$.

Seulement le logarithme ne peut pas être utilisé lorsqu'on a des valeurs nulles ou négatives. Dans ce cas d'autres transformations plus appropriées sans trop déformer les données sont à utiliser. Toute transformation est porteuse de biais mais c'est le seul moyen d'analyser la corrélation entre deux variables.

Le logarithme ne s'applique qu'aux valeurs strictement positives puisque le logarithme de 1 est zéro et celui de zéro n'existe pas. Dans le cas où on a des valeurs nulles ou négatives, il faut soit éliminer ces valeurs ce qui est problématique dans la mesure où cela fausse la réalité, soit adopter une transformation appropriée et là aussi il y a le biais de fausser les données elles-mêmes. Si on a des valeurs négatives qui vont par exemple jusqu'à -5 on peut adopter la forme $\log (x + 6)$ de telle manière que la valeur minimale aurait une valeur nulle: $(\log (-5 + 6) = \log 1 = 0$ mais que représente ce $(x + 6)$?

En outre, le logarithme contribue à exagérer les petites valeurs et contracter les grandes valeurs ce qui revient à donner plus d'importance aux premières.

V.4. La corrélation et la régression linéaires

Une fois on a obtenu une forme linéaire, on applique systématiquement la méthode de la corrélation linéaire à la différence près qu'au lieu de travailler sur les valeurs réelles, on utilise les logarithmes de ces valeurs.

La transformation logarithmique ou autre n'est qu'un moyen pour permettre le calcul des paramètres de la corrélation et de la régression. Une fois on a déterminé les paramètres de la régression, les résidus doivent être calculés avec la formule initiale pour garder leur sens par rapport aux valeurs observées.

Exemple: le modèle puissance. Le modèle puissance s'écrit $y = bx^a$ qui se transforme avec le logarithme en une relation linéaire: $\log y = a \log x + \log b$. En posant $y' = \log y$, $x' = \log x$, $b' = \log b$, on obtient la formulation logarithmique $y' = ax' + b'$.

Le calcul de la corrélation, des paramètres a et b se fait à partir des logarithmes de x et de y .

$$R = \text{Cov } y'x' / \sigma x' \cdot \sigma y' \quad \text{Cov } y'x' = 1/n \sum x'y' - x'_a y'_a \quad x'_a = \sum x'_i / n$$

$$Vx' = 1/n \sum x'^2 - x'^2_a$$

$$a = \text{Cov } y'x' / \sigma x'^2 \quad b' = y'_a - ax'_a \quad e = \sigma y(1 - r^2)^2. \quad x'_a \text{ et } y'_a \text{ sont les moyennes arithmétiques de } x' \text{ et de } y'$$

Une fois les paramètres a, b ($b = 10^{b'}$) et e calculés, on présente le résultat sous la forme initiale du modèle avant transformation logarithmique: $y = bx^a \pm ke$.

V.5. La régression polynomiale

La forme générale d'un modèle polynomial s'écrit comme suit: $y = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ ou d'une manière agrégée: $y = \sum a_i x^i$ avec i variant de 0 à n .

La solution passe par la minimisation de la somme des écarts: $\text{Min } \sum (y_i - \sum a_i x^i)^2$. L'annulation des $(n + 1)$ dérivées partielles donne les équations normales :

$$P = \begin{bmatrix} \sum y & n & \sum x \\ \sum xy & \sum x & \sum x^2 \end{bmatrix}$$

En annulant le déterminant de P ($\Delta P = 0$), c'est-à-dire $n \sum x^2 - (\sum x)^2 = 0$, on obtient la valeur $a = (\sum xy / n - x_a y_a) / \sigma^2 x$

1 – La régression quadratique

L'équation du parabole s'écrit sous la forme : $y = ax^2 + bx + c$ et le polynôme se présente comme suit :

$$P = \begin{bmatrix} Y & 1 & X & X^2 \\ \sum y & n & \sum x & \sum x^2 \\ \sum yx & \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum yx^2 & \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A \\ a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

Dn

On a l'équation matricielle: $[Y] = [X].[A]$ d'où on peut tirer que: $[A] = [Y].[X]^{-1}$. C'est à dire passer par l'inversion de la matrice X et déterminer les coefficients de régression a_i : $a_i = \Delta_i / \Delta$

V.6. La corrélation et la régression multiples

La réalité se réduit rarement à une relation entre deux variables y et x . Elle est plutôt plus complexe et fait appel à plus d'une variable, d'où le recours à des méthodes plus élaborées comme l'analyse multivariée qui fait intervenir plusieurs variables simultanément. A ce titre, il y a plusieurs outils d'analyse selon l'objectif recherché comme la régression multiple, l'analyse factorielle, l'analyse typologique et classificatoire, l'analyse discriminante ou canonique...

La corrélation et la régression multiples permettent l'analyse de la relation entre une variable expliquée ou dépendante (y) et plusieurs variables explicatives ou indépendantes $x_i (x_1, x_2, \dots, x_n)$. C'est la généralisation du modèle de la corrélation et de la régression simples à plusieurs variables x_i , la même méthode va être utilisée ici à la différence qu'on a désormais affaire à plusieurs variables indépendantes x_1, x_2, \dots, x_n .

V.6.1. Le modèle

V.6. 1.1. Le modèle général

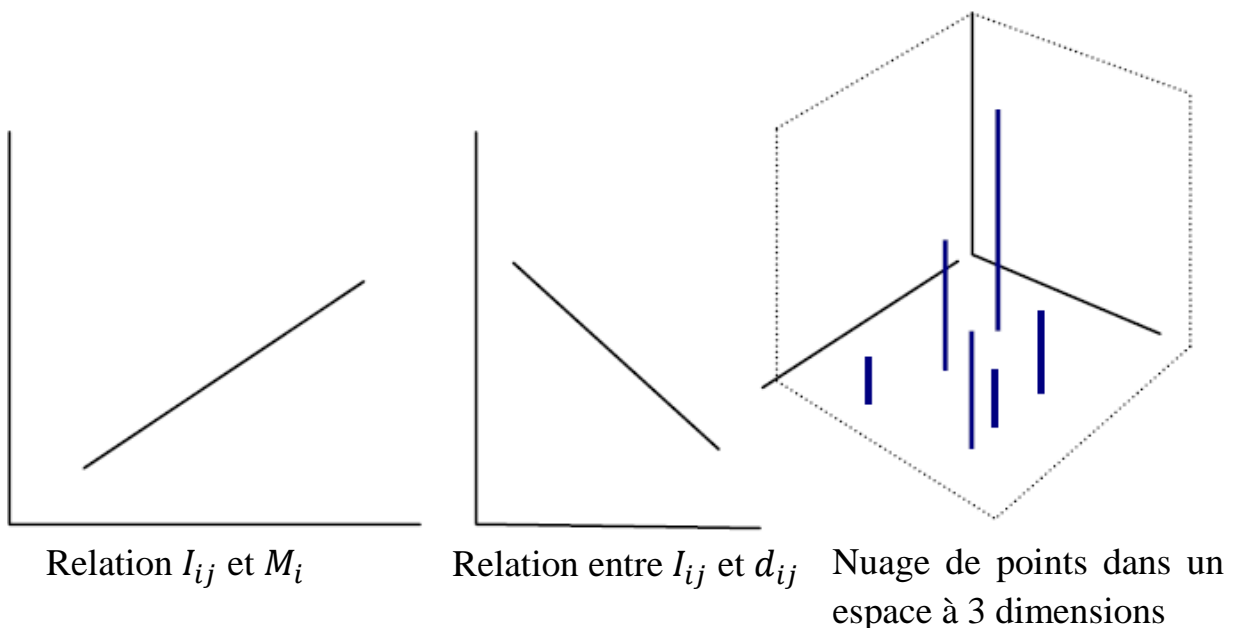
Le modèle général s'écrit: $y = f(x_i) \pm \varepsilon$ avec x_i les variables indépendantes et ε l'élément résiduel. La relation peut être linéaire ou courbe et on a vu lors de l'examen de la régression simple comment linéariser une bonne partie des courbes. L'équation s'écrit, sous sa forme linéaire, comme suit:

$$y = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n + b \pm \varepsilon \text{ ou } y = \sum a_ix_i + b \pm \varepsilon$$

V.6. 1.2. Le choix du modèle

Pour le choix du modèle, on suit les mêmes règles et étapes examinées ci-dessus dans la régression simple: les considérations théoriques, le nuage de point et la corrélation maximale. Le nuage de points ne permet pas dans ce cas, directement le choix du modèle dans la mesure où on a plusieurs variables à la fois. D'autre part, le nuage de points dans un espace à trois dimensions (ou plus) est peu lisible. Les nuages de points effectués séparément entre y et chacune des variables explicatives x_i permettent de voir le type de relations.

C'est ainsi que pour le modèle gravitaire, on sait que par définition l'interaction est proportionnelle à la masse et inversement à la distance. Le modèle peut être écrit comme suit: $I_{ij} = bM_i^\alpha \cdot d_{ij}^\beta$. En outre, en procédant à la représentation graphique entre I_{ij} et M_i d'un côté, I_{ij} et d_{ij} de l'autre, on voit que dans le premier cas, on a une relation croissante et dans le second cas une relation inverse. Le modèle général est souvent plus complexe que les modèles qui régissent les sous-parties.



V.6. 1.3. La linéarisation

Lorsqu'on a une relation multiplicative ou courbe, on passe par la linéarisation de l'équation en utilisant la transformation logarithmique ou toute autre transformation de nature à linéariser la relation. C'est le cas par exemple du modèle gravitaire qui est très utilisé dans les études de polarisation, de flux, d'attraction et de zones d'influence.

Le modèle puissance à deux variables s'écrit par exemple selon l'équation $y = bx_1a_1x_2a_2$. En utilisant la transformation logarithmique, on obtient: $\log y = a_1 \log x_1 + a_2 \log x_2 + \log b$, soit $y' = a_1x'_1 + a_2x'_2 + b'$ avec $y' = \log y$; $x'_1 = \log x_1$; $x'_2 = \log x_2$; $b' = \log b$.

V.6.2. La résolution

Comme pour la corrélation simple, il s'agit de voir dans quelle mesure il y a une relation entre la variable y et les variables indépendantes x_i . Si cette relation est vérifiée significative, et importante à la fois, on passe à la régression pour le calcul des paramètres a_i , b et e . Enfin vient l'étape des résidus, la typologie, la cartographie et l'interprétation de ces écarts.

V.6.2.1. La corrélation multiple

Le coefficient de corrélation partielle de premier ordre entre les facteurs y , x_1 et x_2 à condition que le facteur x_2 demeure inchangé est:

$$r_{yx_1(x_2)} = \frac{r_{yx_1} - r_{yx_2}r_{x_1x_2}}{\sqrt{1 - r_{yx_2}^2}\sqrt{1 - r_{x_1x_2}^2}}$$

Le coefficient de corrélation partielle de second ordre est donné par la relation:

$$r_{yx_1(x_2x_3)} = \frac{r_{yx_1(x_2)} - r_{yx_3(x_2)}r_{x_1x_3(x_2)}}{\sqrt{1 - r_{yx_3(x_2)}^2}\sqrt{1 - r_{x_1x_3(x_2)}^2}}$$

De façon similaire on peut exprimer les relations déterminant les coefficients de corrélation partielle d'ordre k à travers les coefficients d'ordre $k - 1$. Les coefficients de corrélation partielle varient en valeur absolue de 0 à 1.

Pour déterminer la nature de liaison entre les facteurs y et l'ensemble x_1, x_2, \dots, x_i pour une dépendance linéaire on utilise le coefficient de corrélation multiple R . Ce coefficient varie dans l'intervalle de 0 à 1. Si $R = 0$ alors il n'y a

pas de liaison entre y et x_1, x_2, \dots, x_i . Le coefficient de corrélation multiple est calculé à base de l'expression suivante:

$$R = \sqrt{\frac{a_1 r_{yx_1} \sigma_{x_1} + a_2 r_{yx_2} \sigma_{x_2} + \dots + a_n r_{yx_n} \sigma_{x_n}}{\sigma_y}}$$

où a_i – coefficients de régression de l'équation $y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n + b \pm \varepsilon$; r_{yx_i} – coefficients de corrélation partielle; σ_{x_i} – écart-type du facteur x_i ; σ_y – écart-type du facteur y .

En général on n'interprète pas le coefficient de corrélation multiple R , mais son carré R^2 appelé coefficient de détermination multiple.

V.6.2.2. La régression

a. Méthode générale

Il s'agit de minimiser les écarts $\text{Min } e_i^2 = \sum [y - (a_i x_i + b)]^2$ et d'obtenir les équations normales. La dérivation partielle par rapport aux paramètres $a_i (a_1, a_2, \dots, a_n)$ donne les équations normales:

$$\begin{array}{rcl} \sum y = a_1 \sum x_1 + a_2 \sum x_2 + \dots + a_n \sum x_n + nb & & 1 \\ \sum x_1 y = a_1 \sum x_1^2 + a_2 \sum x_1 x_2 + \dots + a_n \sum x_1 x_n + b \sum x_1 & & 2 \\ \sum x_2 y = a_1 \sum x_1 x_2 + a_2 \sum x_2^2 + \dots + a_n \sum x_2 x_n + b \sum x_2 & & 3 \\ \dots\dots\dots & & \dots\dots\dots \\ \sum x_n y = a_1 \sum x_1 x_n + a_2 \sum x_2 x_n + \dots + a_n \sum x_n^2 + b \sum x_n & & n + 1 \end{array}$$

b. Le cas de deux variables

Le modèle général de la régression multiple linéaire pour deux variables x_1 et x_2 se présente comme suit: $y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + b$. Par dérivation partielle ou multiplication on obtient le système d'équations suivant:

$$\begin{array}{rcl} \sum y = a_1 \sum x_1 + a_2 \sum x_2 + nb & & 1 \\ \sum x_1 y = a_1 \sum x_1^2 + a_2 \sum x_1 x_2 + \dots + b \sum x_1 & & 2 \\ \sum x_2 y = a_1 \sum x_1 x_2 + a_2 \sum x_2^2 + b \sum x_2 & & 3 \end{array}$$

En résolvant le système ci-dessus on obtient les valeurs des paramètres a_1 , a_2 et b .

VI. SEGMENTATION (CLUSTERING)

VI.1. Problématique de la segmentation

Soient N instances de données à k attributs, la segmentation consiste à trouver un partitionnement en c clusters (groupes) ayant un sens (Similitude). L'affectation automatique de "labels" aux clusters c peut être donné, ou "découvert". La segmentation s'avère plus difficile que la classification car les classes ne sont pas connues à l'avance (non supervisé).

Les attributs peuvent être soit numériques (distance bien définie) soit énumératifs ou mixtes (distance difficile à définir).

VI.2. Qualité de la segmentation

Une bonne méthode de clustering produira des clusters d'excellente qualité avec une similarité **intra classe** importante et une similarité **interclasse** faible. La qualité d'un clustering dépend de la mesure de similarité utilisée et de l'implémentation de la mesure de similarité. La qualité d'une méthode de clustering est évaluée par son habilité à découvrir certains ou tous les "patterns" cachés.

L'objectif du clustering consiste à minimiser les distances interclasses et à maximiser les distances intra classes.

VI.3. Application pratique du clustering

La segmentation est utilisée dans les domaines suivants:

1. *Marketing*. En marketing le clustering est utilisé pour la segmentation du marché en découvrant des groupes de clients distincts à partir des bases des données d'achats.
2. *Environnement*. La segmentation est utilisée pour l'identification des zones terrestres similaires(en termes d'utilisation) dans une base des données d'observation de la terre.
3. *Assurance*. La segmentation est utilisée pour l'identification de groupes d'assurés distincts associés à un nombre important de déclarations.

4. *Planification des villes.* La segmentation est utilisée pour l'identification des groupes d'habitations suivant le type d'habitation, valeur, localisation géographique, ...
5. *Médecine.* La segmentation est utilisée pour la localisation de tumeurs dans le cerveau. A partir du nuage de points du cerveau fournis par le neurologue on procède à l'identification des points définissant une tumeur.

VI.4. Mesure de la similarité

Il n'y a pas de définition unique de la similarité entre objets. On utilise différentes mesures de distances $d(x, y)$. La définition de la similarité entre objets dépend du type des données considérées et du type de similarité recherchée.

VI.4.1. Choix de la distance

Les propriétés d'une distance sont:

- 1) $d(x, y) \geq 0$
- 2) $d(x, y) = 0$ **si** $x = y$
- 3) $d(x, y) = d(y, x)$
- 4) $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$

Pour chacun des champs numériques la distance est donnée par l'expression

$$d(x, y) = |x - y|$$

La distance normalisée est donnée par l'expression

$$d(x, y) = |x - y|/dmax$$

VI.4.2. Combinaison des distances

Soient $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ **et** $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ des exemples numériques.

La distance euclidienne est donnée par l'expression

$$d(x, y) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}$$

La distance de Manhattan est donnée par l'expression

$$d(x, y) = \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|$$

La distance de Minkowski est donnée par l'expression

$$d(x, y) = \sqrt[k]{\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^k}$$

VI.4.3. Calcul de la distance pour les données binaires

La table de contingence (dissimilarité) se présente de la façon suivante:

		Objet j		
		1	0	sum
Objet i	1	a	b	a+b
	0	c	d	c+d
	sum	a+c	b+d	p

Le coefficient de correspondance simple (similarité invariante, si la variable binaire est symétrique) est donné par l'expression suivante :

$$d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c + d}$$

Le coefficient de Jaccard (similarité non invariante, si la variable binaire est asymétrique) est donné par l'expression suivante :

$$d(i, j) = \frac{b + c}{a + b + c}$$

L'exemple de dissimilarité entre variables binaires à partir de la table de patients est reflété par le tableau suivant:

Nom	Sexe	Fièvre	Toux	Test-1	Test-2	Test-3	Test-4
Jack	M	Y	N	P	N	N	N
Mary	F	Y	N	P	N	P	N

Jim	M	Y	P	N	N	N	N
-----	---	---	---	---	---	---	---

On a 8 attributs dont un seul (sexe) est symétrique. Les sept autres sont asymétriques.

Les valeurs Y et P sont initialisées à 1, et la valeur N à 0.

On calcule la distance entre patients, basée sur le coefficient de Jaccard.

$$d(Jack, Mary) = \frac{0 + 1}{2 + 0 + 1} = 0.33$$

$$d(Jack, Jim) = \frac{1 + 1}{1 + 1 + 1} = 0.67$$

$$d(Jim, Mary) = \frac{2 + 1}{1 + 1 + 2} = 0.75$$

VI.4.4. Calcul de la distance pour les données énumératives

Généralisation des variables binaires, avec plus de 2 états , e.g., rouge, jaune, bleu, vert

Méthode1: corrépondance simple

m : # de correspondances, p : # total de variables,

$$d(i, j) = \frac{p - m}{p}$$

Calcul de la distance pour les données mixtes

Exemple: (Age, Propriétaire résidence principale, montant des mensualités en cours)

$$x = (30, 1, 1000), y = (40, 0, 2200), z = (45, 1, 4000)$$

$$d(x, y) = \sqrt{(10/15)^2 + 1^2 + (1200/3000)^2} = 1.27$$

$$d(x, z) = \sqrt{(15/15)^2 + 0^2 + (3000/3000)^2} = 1.41$$

$$d(y, z) = \sqrt{(5/15)^2 + 1^2 + (1800/3000)^2} = 1.21$$

Le plus proche voisin de x est y .

On rappelle que pour calculer la distance normalisée on effectue une sommation.

$$d(x, y) = d_1(x_1, y_1) + \dots + d_n(x_n, y_n)$$

VI.5. Algorithme des k -moyennes (k -means)

A l'entrée de l'algorithme on a un échantillon de m enregistrements x_1, \dots, x_m .

On procède de la façon suivante:

- 1) Choisir k centres initiaux c_1, \dots, c_k
- 2) Répartir chacun des m enregistrements dans le groupe i dont le centre c_i est le plus proche.
- 3) Si aucun élément ne change de groupe alors arrêter et sortir les groupes
- 4) Calculer les nouveaux centres : pour tout i , c_i est la moyenne des éléments du groupe i .
- 5) Aller en 2.

VI.6. Méthodes hiérarchiques de segmentation

La méthode hiérarchique construit une hiérarchie de clusters, non seulement une partition unique des objets. Le nombre de clusters k n'est pas exigé comme donnée. On utilise une matrice de distances comme critère de clustering. Une condition de terminaison peut être utilisée (exemple: le nombre de clusters).

VI.6.1. Algorithme des méthodes hiérarchiques de segmentation

A l'entrée on a un échantillon de m enregistrements x_1, \dots, x_m :

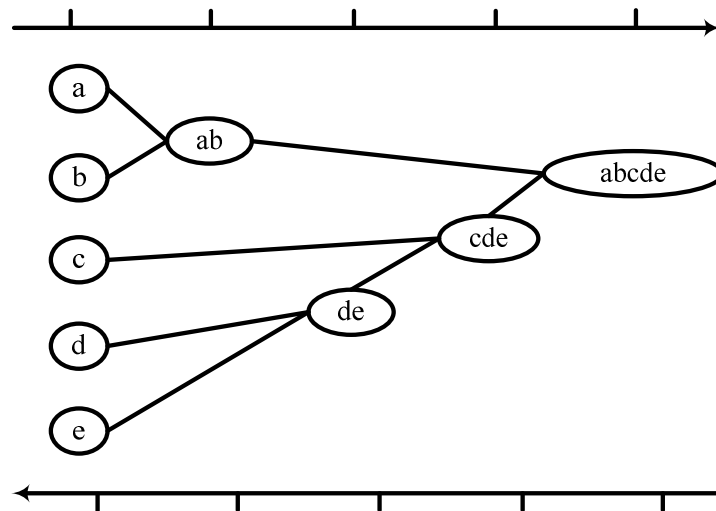
- 1) On commence avec m clusters (cluster = 1 enregistrement)
- 2) Grouper les deux clusters les plus «proches».
- 3) S'arrêter lorsque tous les enregistrements sont membres d'un seul groupe
- 4) Aller en 2.

VI.6.2. Arbre de clusters

Le résultat d'un arbre de clusters est un graphe hiérarchique qui peut être coupé à un niveau de dissimilarité pour former une partition.

La hiérarchie de clusters est représentée comme un *arbre de clusters*, appelé *dendrogramme*. Les feuilles de l'arbre représentent les objets. Les nœuds intermédiaires de l'arbre représentent les clusters.

Exemple d'un arbre de clusters



VI.6.3. Treillis de concepts

Un treillis de concepts est une structure hiérarchique permettant de représenter les clusters dans laquelle chaque nœud correspond à un cluster. Chaque cluster est représenté par son intension (les propriétés communes à un cluster) et peut aussi contenir son extension (les lignes contenant l'intension du cluster). Chaque élément d'un étage du treillis peut être contenu dans celui au dessus, et chaque lien entre deux éléments représente alors un lien de parenté entre ces éléments. Par exemple, ABC est inclus dans ABCE qui est lui-même inclus dans ABCDE. Tout treillis comprend un seul sommet et une seule base. Voici ci-dessous un exemple de treillis, appelé treillis des sous-ensembles ou treillis des parties, pour un jeu de données contenant cinq items A, B, C, D et E. Dans celui-ci ABCDE est le sommet et \emptyset est la base du treillis (l'extension n'est pas représentée):

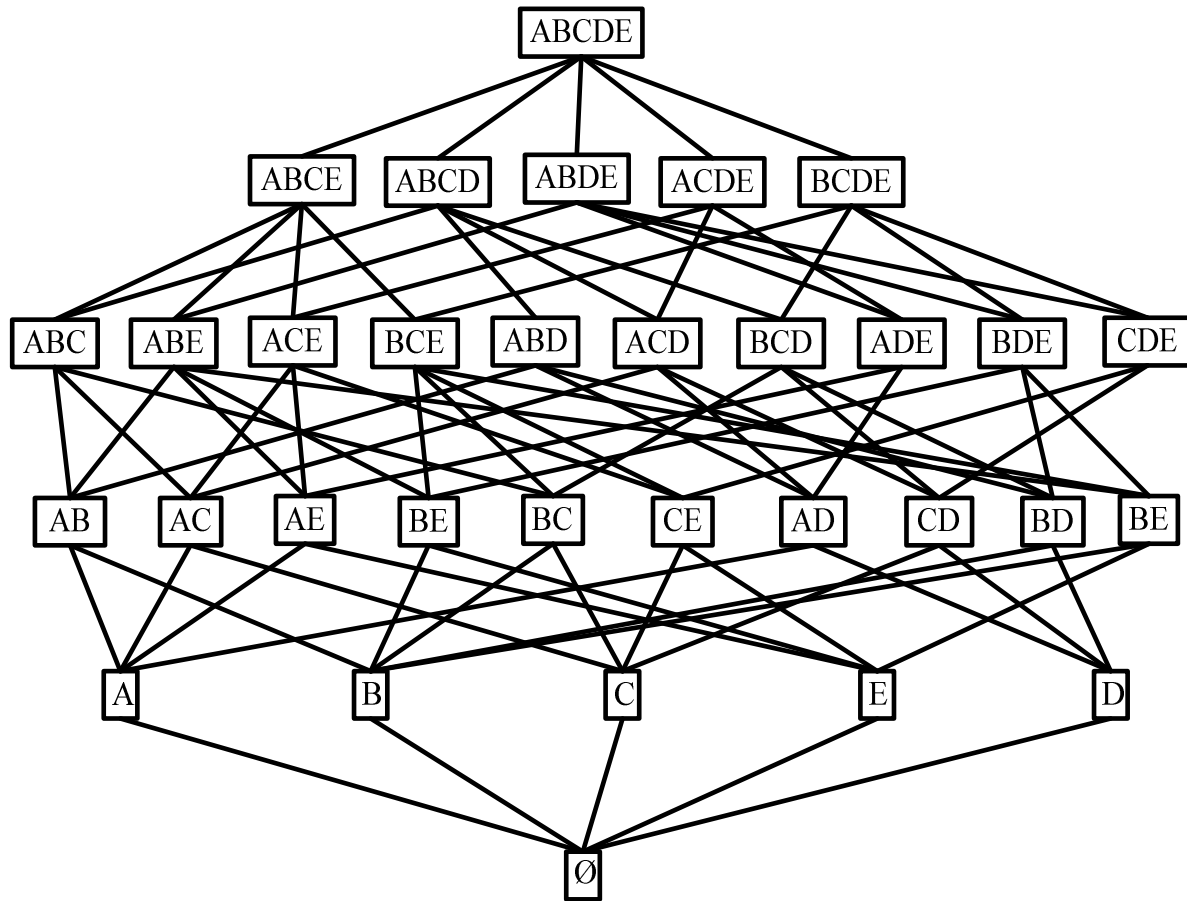


Figure 1. Exemple du treillis des parties d'un jeu de données constitué des items {A, B, C, D, E}

Distance entre clusters

Pour calculer la distance entre les clusters on utilise les notions suivantes :

- Distance entre les centres des clusters (Centroid Method)
- Distance minimale entre toutes les paires de données des 2 clusters (Single Link Method)

$$d(i, j) = \min_{x \in C_i, y \in C_j} \{d(x, y)\}$$

- Distance maximale entre toutes les paires de données des 2 clusters (Complete Link Method)

$$d(i, j) = \max_{x \in C_i, y \in C_j} \{d(x, y)\}$$

- Distance moyenne entre toutes les paires d'enregistrements (Average Linkage)

$$d(i, j) = \text{avg}_{x \in C_i, y \in C_j} \{d(x, y)\}$$

VI.6.4. Les avantages des méthodes hiérarchiques

Les avantages des méthodes hiérarchiques sont :

- Les méthodes hiérarchiques sont conceptuellement simples;
- Les méthodes hiérarchiques possèdent des propriétés théoriques bien connues;
- Quand les clusters sont groupés les méthodes hiérarchiques rendent la décision définitive puisque le nombre d'alternatives différentes à examiner est réduit.

VI.6.5. Les inconvénients des méthodes hiérarchiques

Les inconvénients des méthodes hiérarchiques sont :

- Les méthodes hiérarchiques rendent le groupement de clusters définitif car les décisions erronées sont impossibles à modifier ultérieurement;
- Les méthodes hiérarchiques ne sont pas extensibles pour des ensembles de données de grandes tailles.

VI.7. Les méthodes basées sur la densité

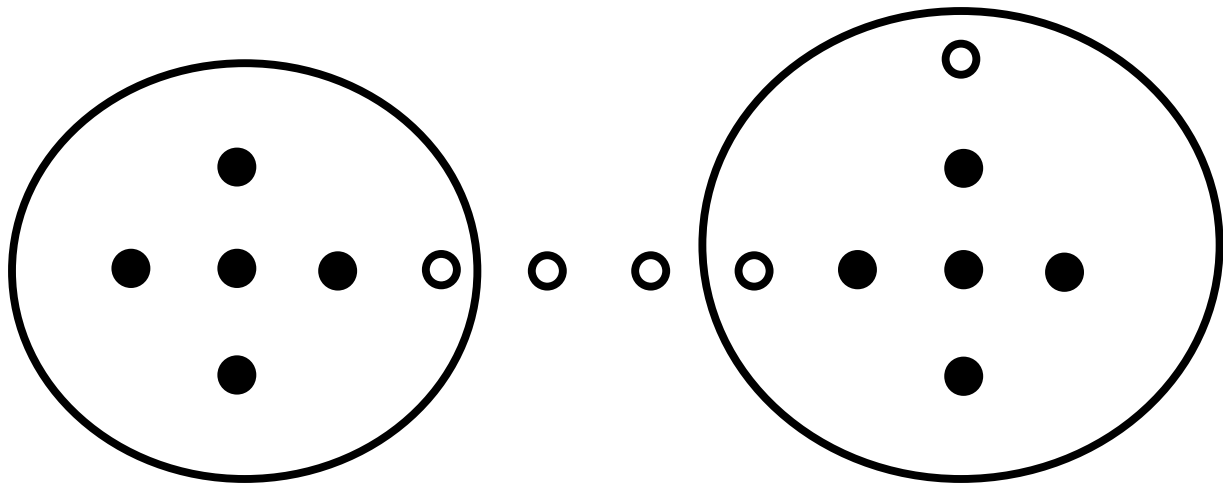
Pour ce type de problèmes, l'utilisation de mesures de similarité (distance) est moins efficace que l'utilisation de densité de voisinage. Minimiser la distance inter-clusters n'est pas toujours un bon critère pour reconnaître des «formes» (applications géographiques, reconnaissance des formes et des tumeurs, ...).

Soit d^* un nombre réel positif. Si $d(P, Q) \leq d^*$, Alors P et Q appartiennent au même cluster. Si P et Q appartiennent au même cluster, et $d(Q, R) \leq d^*$, Alors P et R appartiennent au même cluster.

Soit e^* un nombre réel positif. Un point P est *dense* ssi

$$|\{Q / d(P, Q) \leq d^*\}| \geq e^*$$

Si P et Q appartiennent au même cluster, et $d(Q, R) \leq d^*$ et Q est dense, alors P et R appartiennent au même cluster. Les points non-denses sont appelés points de «*bordure*». Les points en dehors des clusters sont appelés «*bruits*».



Deux clusters sont trouvés. Deux points sont des «bruits». Trois points sont des «bordures».

VII. CLASSIFICATION

La *classification* permet de prédire si une instance donnée est membre d'un groupe ou d'une classe prédéfinie. *Par classe* on entend un groupe d'instances avec des profils particuliers.

La classification est un processus à deux étapes suivantes:

- 1) Construction du modèle à partir de l'ensemble d'apprentissage (training set)
- 2) Utilisation du modèle: tester la précision du modèle et l'utiliser dans la classification de nouvelles données

1) Construction du modèle

Pour construire le modèle de classification chaque instance est supposée appartenir à une *classe prédéfinie*. La classe d'une instance est déterminée par l'attribut "**classe**". L'ensemble des instances d'*apprentissage* est utilisé dans la construction du modèle. Le modèle est *représenté* par des règles de classification, arbres de décision, formules mathématiques, ...

2) Utilisation du modèle

Quand le modèle de classification est construit on l'utilise pour Classer les *nouvelles* instances ou instances *inconnues et pour* et pour *Estimer le taux d'erreur du modèle*. La classe connue d'une instance test est comparée avec le résultat du modèle. Le taux d'erreur est égal au pourcentage de tests incorrectement classés par le modèle.

VII.1.Validation de la Classification (accuracy)

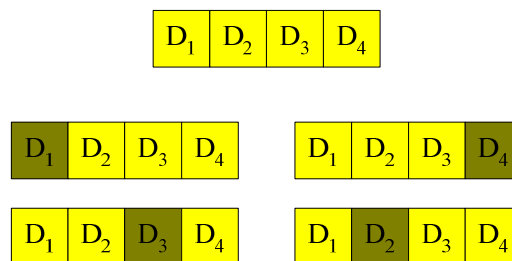
Estimation des taux d'erreurs

Pour estimer les taux d'erreurs on procède au partitionnement: apprentissage et test (ensemble de données important). On utilise deux ensembles indépendants, e.g., ensemble d'apprentissage(2/3), ensemble test (1/3).

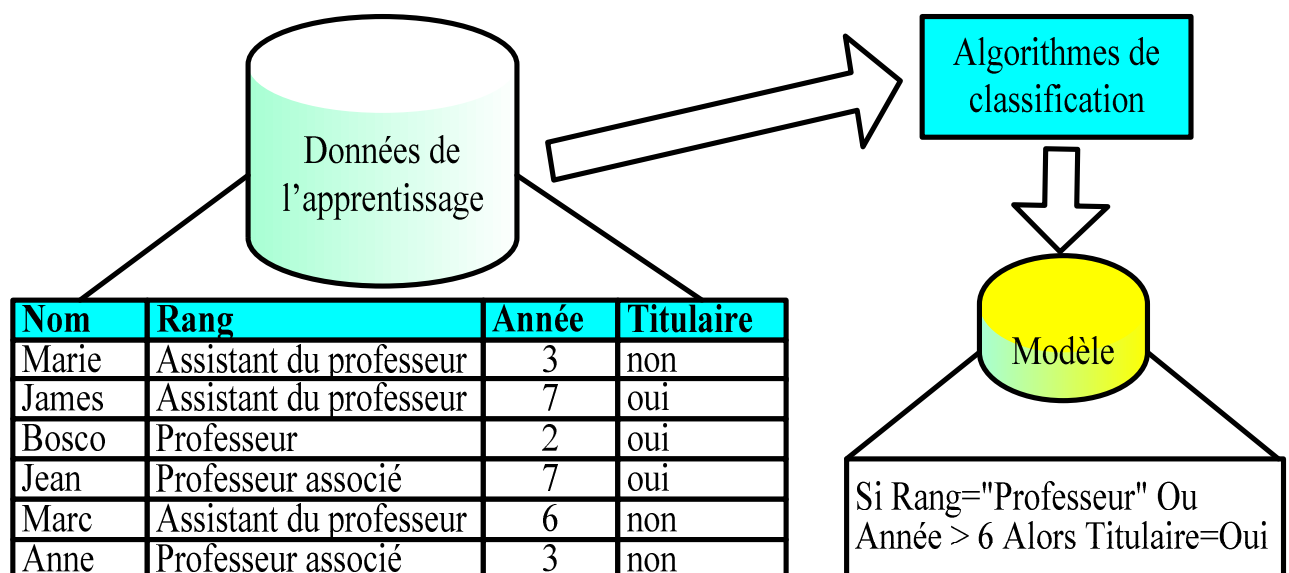
Apprentissage D_t	Validation D/D_t
---------------------	--------------------

Validation croisée (ensemble de données modéré)

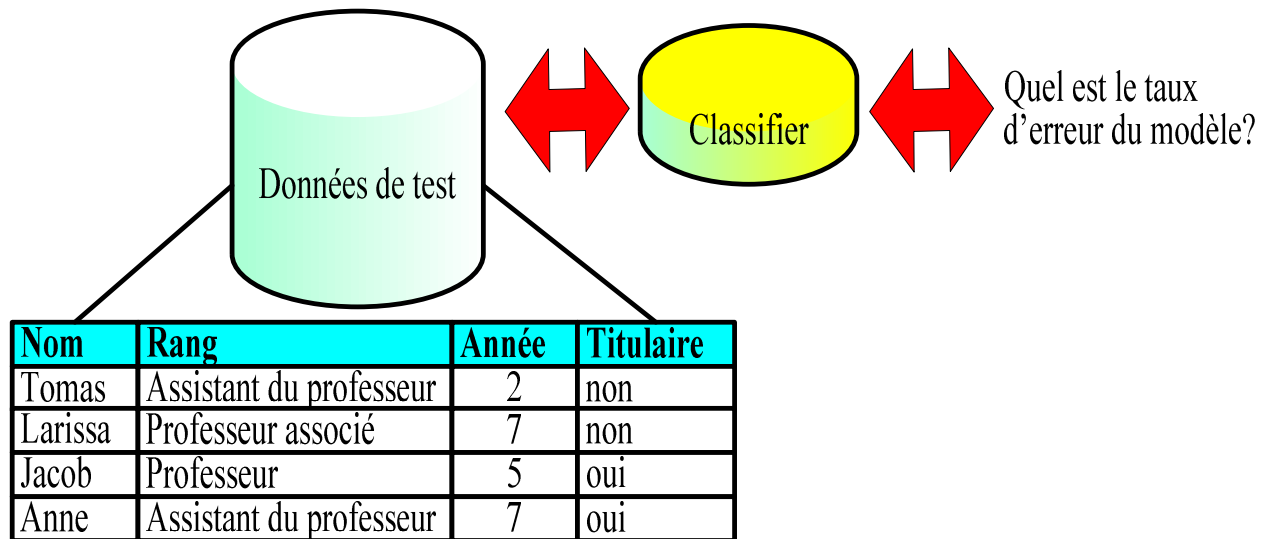
Pour la validation croisée on divise les données en k sous-ensembles. Après on utilise k – 1 sous-ensembles comme données d'apprentissage et un sous-ensemble comme données test.



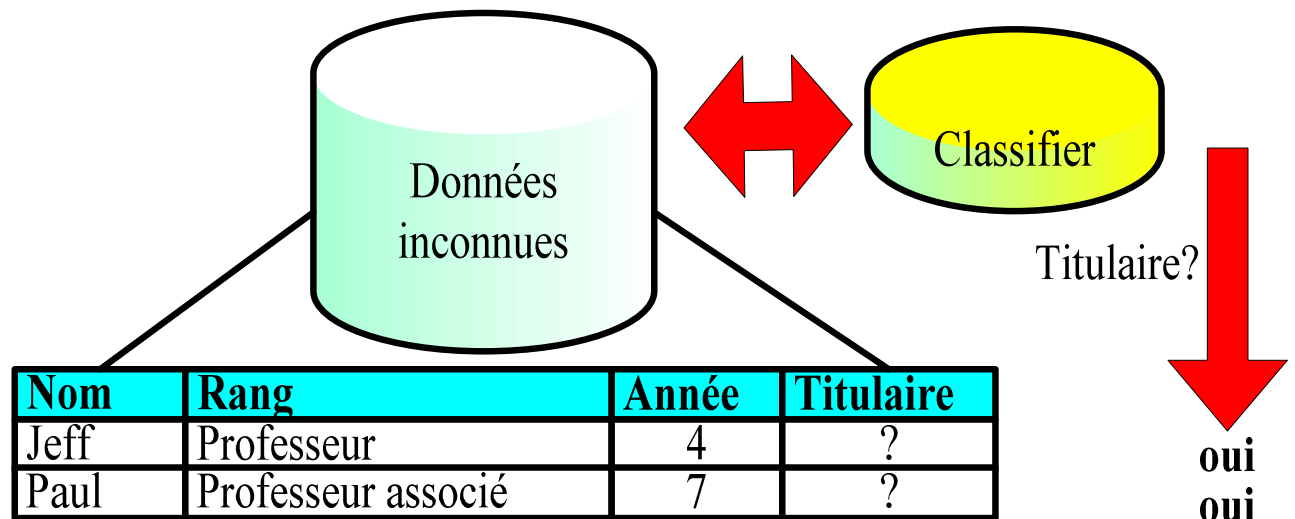
Exemple de construction du modèle



Exemple d'utilisation du modèle



Exemple d'Application du modèle sur les données inconnues



Pour résoudre un problème de classification on peut utiliser la méthode $K - NN$ (plus proches voisins), Les arbres de décision, les réseaux de neurones, la classification bayésienne...

VII.2. Méthode des plus proches voisins

La méthode des plus proches voisins est une méthode dédiée à la classification ($k - NN$: nearest neighbor). C'est une méthode de raisonnement à partir de cas: prendre des décisions en recherchant un ou des cas similaires déjà résolus. Il n'y a pas d'étape d'apprentissage. On construit le modèle à partir d'un échantillon d'apprentissage (réseaux de neurones, arbres de décision, ...).

Le modèle est composé par un échantillon d'apprentissage, la fonction de distance et fonction de choix de la classe en fonction des classes des voisins les plus proches.

Algorithme de la méthode des plus proches voisins

L'objectif de l'algorithme consiste à affecter une classe à une nouvelle instance. Comme donnée on considère un échantillon de m enregistrements classés $(x, c(x))$. A l'entrée de l'algorithme on a un enregistrement y . On réalise les étapes suivantes:

- 1) Déterminer les k plus proches enregistrements de y
- 2) Combiner les classes de ces k exemples en une classe c
- 3) Faire sortir la classe de y c'est-à-dire $c(y) = c$.

Pour sélectionner la classe on peut utiliser la solution simple consistant à rechercher le cas le plus proche et prendre la même décision. On peut aussi utiliser une combinaison des k classes par:

- Heuristique avec $k = \text{nombre d'attributs} + 1$
- Vote majoritaire consistant à prendre la classe majoritaire.
- Vote majoritaire pondéré. Chaque classe est pondérée. Le poids de $c(x_i)$ est inversement proportionnel à la distance (y, x_i) .

On peut aussi utiliser la confiance. Définir une confiance dans la classe attribuée qui est égale au rapport entre les votes gagnants et le total des votes.

VII.3. Arbres de décision

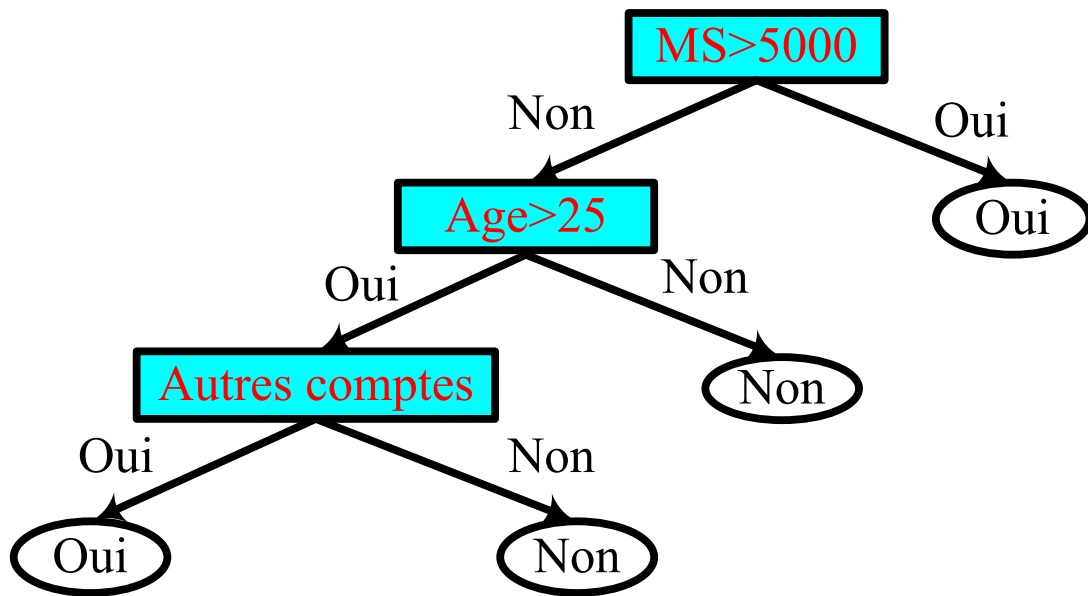
Les arbres de décision sont générés à partir des données. L'arbre de décision est une représentation graphique d'une procédure de classification.

Un arbre de décision est un arbre où:

- Un nœud interne représente un attribut
- Une branche d'un nœud représente un test sur un attribut
- Les feuilles représentent une classe donnée

Accord d'un prêt bancaire

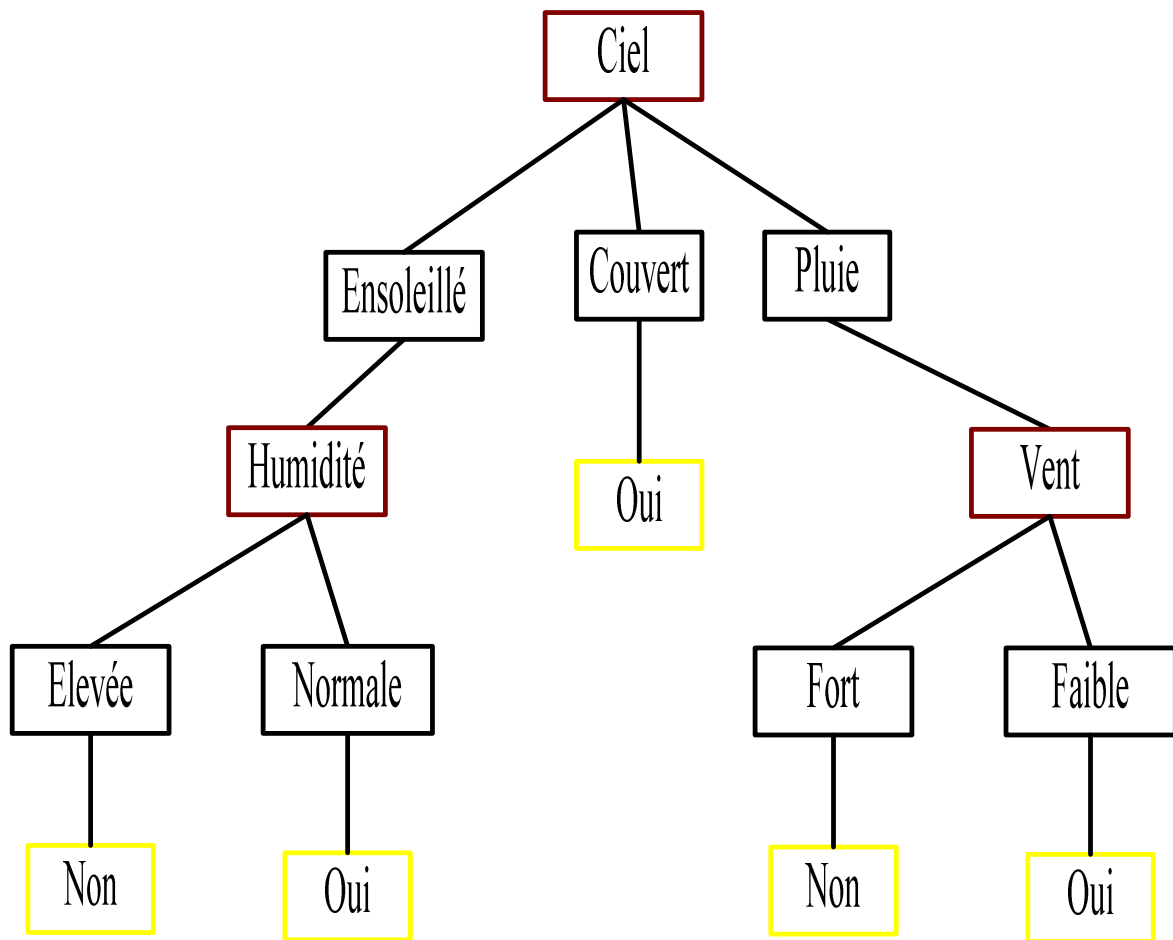
MS: solde courant en moyenne



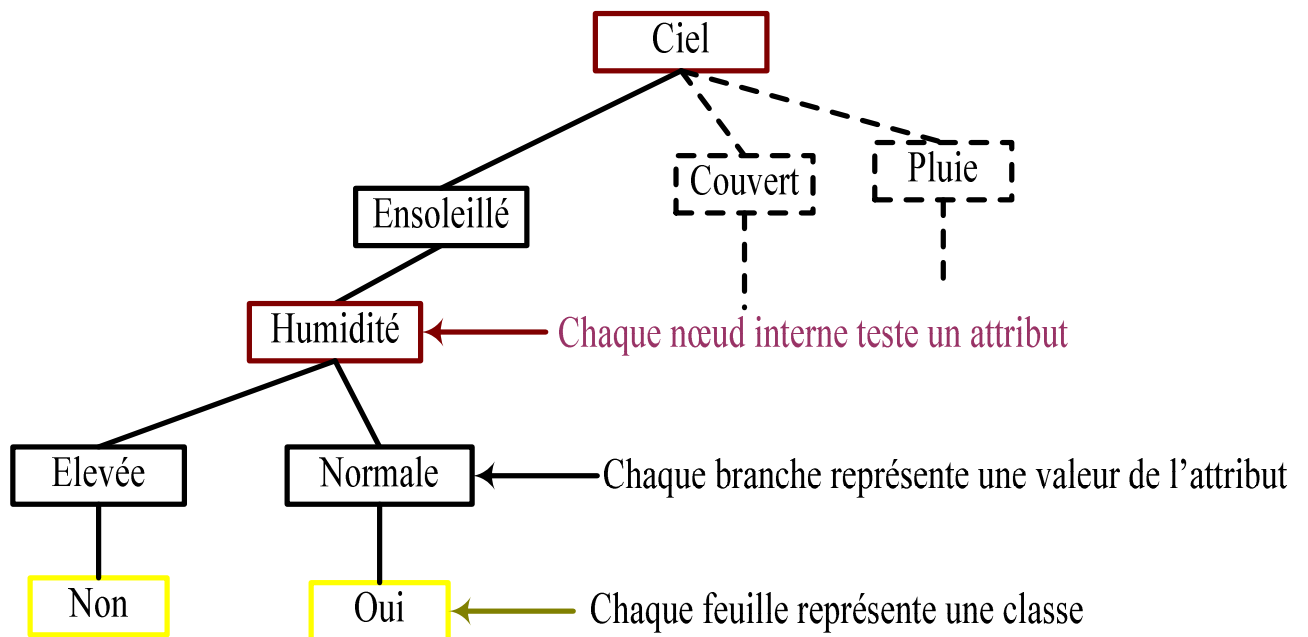
Exemple d'arbre de décision

Soit l'ensemble de l'apprentissage dont il faut former deux classes (Jouer ou non au tennis)

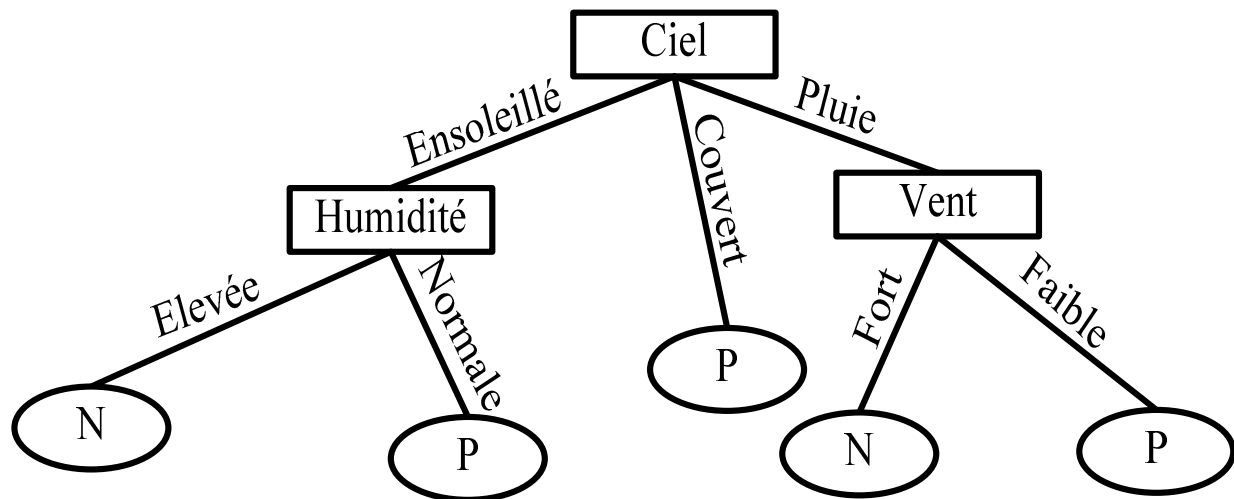
Ciel	Température	Humidité	Vent	Jouer au tennis?
Ensoleillé	Chaude	Elevée	Faible	Non
Ensoleillé	Chaude	Elevée	Fort	Non
Couvert	Chaude	Elevée	Faible	Oui
Pluie	Tiède	Elevée	Faible	Oui
Pluie	Fraîche	Normale	Faible	Oui
Pluie	Fraîche	Normale	Fort	Non
Couvert	Fraîche	Normale	Fort	Oui
Ensoleillé	Tiède	Elevée	Faible	Non
Ensoleillé	Fraîche	Normale	Faible	Oui
Pluie	Tiède	Normale	Faible	Oui
Ensoleillé	Tiède	Normale	Fort	Oui
Couvert	Tiède	Elevée	Fort	Oui
Couvert	Chaude	Normale	Faible	Oui
Pluie	Tiède	Elevée	Fort	Non



Exemple–Jouer au tennis ?



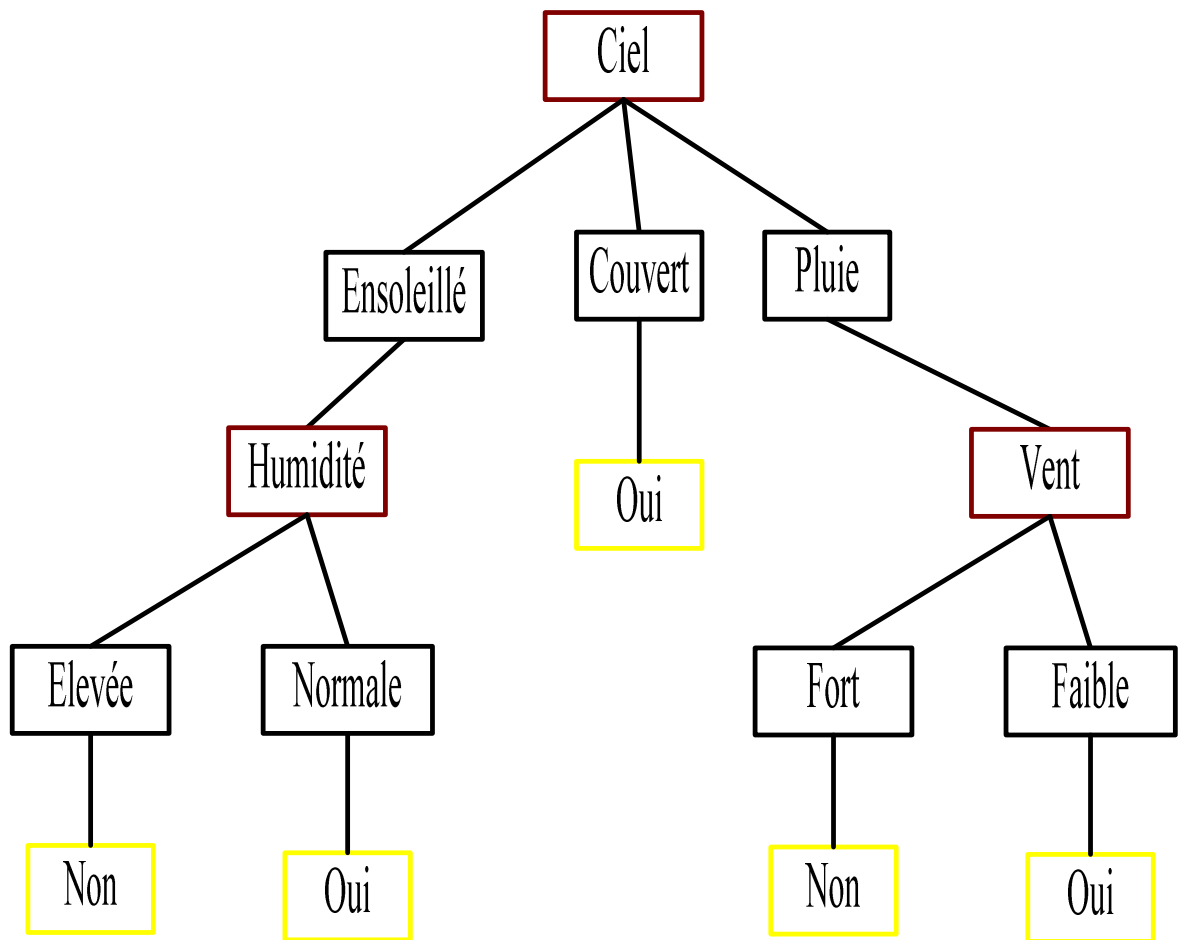
VII.3.1. De l'arbre de décision aux règles de classification



Si Ciel=Ensoleillé *Et* humidité=normale *Alors* Jouer au tennis

Pour générer les règles on suit le procédé suivant:

- Une règle est générée pour chaque chemin de l'arbre (de la racine à une feuille);
- Les paires attribut-valeur d'un chemin forment une conjonction;
- Le nœud terminal représente la classe prédite;
- Les règles sont généralement plus faciles à comprendre que les arbres.



A partir de l'arbre ci-dessus on peut générer les règles suivantes:

R_1 : **Si** (Ciel = Ensoleillé) \wedge (Humidité = Elevée) **Alors** Jouer au tennis = Non

R_2 : **Si** (Ciel = Ensoleillé) \wedge (Humidité = Normale) **Alors** Jouer au tennis = Oui

R_3 : **Si** (Ciel = Couvert) **Alors** Jouer au tennis = Oui

R_4 : **Si** (Ciel = Pluie) \wedge (Vent = Fort) **Alors** Jouer au tennis = Non

R_5 : **Si** (Ciel = Pluie) \wedge (Vent = Faible) **Alors** Jouer au tennis = Oui

VII.3.2. Génération de l'arbre de décision

On distingue deux phases de génération de l'arbre de décision:

- 1) La phase de construction de l'arbre. Au cours de cette phase l'arbre peut atteindre une taille élevée.
- 2) La phase suivante consiste à élaguer l'arbre (Pruning). Au cours de cette phase on identifie et on supprime les branches qui représentent du "bruit". On améliore le taux d'erreur.

VII.3.2.1. Construction de l'arbre

Lors de la construction de l'arbre de décision on réalise les étapes suivantes:

- on détermine, au départ, toutes les instances d'apprentissage qui sont à la racine de l'arbre.
- On sélectionne un attribut et on choisit un test de séparation (split) sur l'attribut qui sépare le "mieux" les instances. La sélection des attributs est basée sur une heuristique ou une mesure statistique.
- On partitionne les instances entre les nœuds fils suivant la satisfaction des tests logiques.
- On traite chaque nœud fils de façon récursive.
- On répète jusqu'à ce que tous les nœuds soient des terminaux. Un nœud courant est terminal si:
 - a) Il n'y a plus d'attributs disponibles.
 - b) Le nœud est "pur", c'est-à-dire que toutes les instances appartiennent à une seule classe.
 - c) Le nœud est "presque pur", par exemple la majorité des instances appartiennent à une seule classe (Exemple : 95%).
 - d) Le nombre minimal d'instances par branche évite la croissance de l'arbre.
- On étiquète le nœud terminal par la classe majoritaire.

VII.3.2.2. Elaguer l'arbre obtenu (pruning)

Elaguer l'arbre de décision est un processus en deux étapes :

- * Supprimer les sous arbres qui n'améliorent pas l'erreur de la classification (accuracy), comme résultat on obtient un arbre ayant un meilleur pouvoir de généralisation même si on augmente l'erreur sur l'ensemble d'apprentissage
- * Eviter le problème de surspécialisation (over-fitting), par exemple, on a appris "par cœur" l'ensemble d'apprentissage, mais on n'est pas capable de généraliser.

VII.3.3. Surspécialisation de l'arbre de décision

L'arbre généré peut sur spécialiser l'ensemble d'apprentissage sur plusieurs branches quand le taux d'erreur est important pour les instances inconnues.

Les raisons de la sur spécialisation sont: bruits et exceptions, peu de donnée d'apprentissage et Maxima locaux dans la recherche gloutonne.

Deux approches pour éviter l'overfitting:

- Pré-élagage consistant à arrêter de façon prématurée la construction de l'arbre
- Post élagage consistant à supprimer des branches de l'arbre complet ("fully grown")

VIII. REGLES D'ASSOCIATION

VIII.1. Identification générale des règles d'association

Les règles d'associations sont extraites à partir d'un jeu des données composé d'un ensemble de lignes où chacune est composée d'un ensemble de valeurs d'attributs. Le tableau ci-dessous présente un exemple simple de jeu des données où par exemple

{Ciel = Pluie, température = Tiède, Humidité = Normale, Vent = Fort}

est un itemset composé d'un ensemble d'items correspondant chacun à une valeur d'un attribut.

Jour	Ciel	Température	Humidité	Vent	Jouer au tennis?
1	Ensoleillé	Chaude	Elevée	Faible	Non
2	Ensoleillé	Chaude	Elevée	Fort	Non
3	Couvert	Chaude	Elevée	Faible	Oui
4	Pluie	Tiède	Elevée	Faible	Oui
5	Pluie	Fraîche	Normale	Faible	Oui
6	Pluie	Fraîche	Normale	Fort	Non
7	Couvert	Fraîche	Normale	Fort	Oui
8	Ensoleillé	Tiède	Elevée	Faible	Non
9	Ensoleillé	Fraîche	Normale	Faible	Oui
10	Pluie	Tiède	Normale	Faible	Oui
11	Ensoleillé	Tiède	Normale	Fort	Oui
12	Couvert	Tiède	Elevée	Fort	Oui
13	Couvert	Chaude	Normale	Faible	Oui
14	Pluie	Tiède	Elevée	Fort	Non

Tableau 1. Exemple d'un jeu des données

A partir de ces données on extrait des règles d'association qui expriment chacune un lien entre un couple de variables booléennes (a, b) où a et b n'ont pas d'items en commun. Par exemple:

«*Ciel = Ensoleillé \rightarrow Température = Chaude, Humidité = Elevée*». Ceci revient à dire que si le ciel est ensoleillé alors la température est chaude et le taux d'humidité est élevé. De plus, chaque règle d'association est évaluée par des indices, qui sont le support et la confiance qui permettent d'identifier les règles les plus utiles.

Le support d'une règle définit le nombre de lignes du jeu des données contenant la règle. Il se calcule comme suit:

$$\text{Support}(\text{antécédent} \rightarrow \text{conséquence}) = \frac{\text{COUNT}(\text{antécédent}, \text{conséquence})}{\text{COUNT}()}$$

Support («Ciel= Ensoleillé \rightarrow Température= Chaude, Humidité= Elevée»)

= COUNT («Ciel= Ensoleillé \rightarrow Température= Chaude, Humidité= Elevée») / COUNT

=2/14=14,28%

Le support d'une règle [NP] est défini par l'expression suivante:

$$\text{Support}[NP] = \frac{\text{COUNT}(a, b, c)}{\text{COUNT}()}$$

où $\text{COUNT}(a, b, c)$ est une fonction qui calcule le nombre de lignes du jeu des données qui contiennent à la fois a, b et c , et $\text{COUNT}()$ calcule le nombre total de lignes dans un jeu des données.

La confiance d'une règle [NP] définit la proportion des lignes contenant la conséquence parmi toutes celles qui contiennent la prémisse. Ainsi, la confiance détermine la précision de la règle. On appelle règles exactes celles dont la confiance est égale à 100%, et règles approximatives ou partielles celles dont la confiance est strictement inférieure à 100%. La confiance se calcule de la manière suivante:

$$\text{Confiance}(\text{antécédent} \rightarrow \text{conséquence}) = \frac{\text{Support}(\text{antécédent} + \text{conséquence})}{\text{Support}(\text{antécédent})}$$

Confiance (Ciel= Ensoleillé \rightarrow Température= Chaude, Humidité= Elevée)

= support (Ciel= Ensoleillé, Température= Chaude, Humidité= Elevée)/ support (Ciel= Ensoleillé)

= COUNT (Ciel= Ensoleillé, Température= Chaude, Humidité= Elevée) / COUNT (Ciel= Ensoleillé)

= 2/5 = 40%.

VIII.2. Exemple d'identification des règles d'association à partir d'une base des données

Main windows

WizWhy1

Main Window

Summary Report

If-Then Rule

Trend Report

Unexpected Rules

If-and-only-if Rule

Unexpected Rules

Basic Data Rule Parameters Error Costs Rule Report Manual Select Data Format Prediction Input

Dependent Variable : Cash

The total range of the Field's values is: 0,00 - 130 065,10

Average: 253,31 Standard Deviation: 4 222,14 Median: 6,40

Select the range of values to be analyzed in the rules (Boolean analysis):

Predicted Value: ☒ More than: 253,31 Frequency: 6,33 %

☐ Less or equal than: 130065,10

Minimum probability of if-then rules: 9 %

Minimum probability of if-then-NOT rules: 96 %

Minimum number of cases in a rule: 20 2,0%

Maximum number of conditions in a rule: 3

☒ Search for Unexpected Rules

☐ Re-display Rule Parameters after reading the data.

SUMMARY REPORT

WizWhy Version 2011 Demo

PARAMETERS OF THE RULES AND DATA

C:\Users\Public\WizSoft\WizWhy Demo\Stock.mdb

Total number of records: 1000

Minimum probability of the:

1) if-then rules: 0,090

2) if-then-not rules: 0,960

Minimum number of cases in a rule: 20

The Demo version is limited to 1000 records.

Dependent Variable: Cash

Predicted Value (analyzed as Boolean): more than 253,31

Number of rules 1534

Prediction error costs:

The cost of a miss: 1

The cost of a false alarm: 1

Average probability of the predicted value is 0,063
 Number of records where Dependent Variable is missing: 4

ANALYSIS OF THE RULES EXPLANATORY POWER

Number of misses: 21
 Number of false alarms: 4
 Total number of errors: 25
 Total cost of errors: 25
 Success rate when predicting more than 253,31 : 0,913
 Success rate when predicting NOT more than 253,31 : 0,978
 Number of records with no relevant rules: 0
 Average cost (per record): 0,025
 Expected average cost (per record): 0,062
 Improvement Factor: 2,480

LIST OF THE FIELDS

No.	Field Name	Field Type	Analyze if Empty	Ignore Field
1.	Cash	Number		
2.	Company name	Category		
3.	Cost of goods s...	Number		
4.	Current assets	Number		
5.	Current liabili...	Number		
6.	Dividend	Number		
7.	Equity (common)	Number		
8.	Goodwill and in...	Number		
9.	Industry	Category		
10.	Liabilities and...	Number		
11.	Long-term debt	Number		
12.	Long-term inves...	Number		
13.	Net fixed asset...	Number		
14.	Net income	Number		
15.	Other long-term...	Number		
16.	Other long-ter...s	Number		
17.	Preferred stock	Number		
18.	Research and de...	Number		
19.	Sales	Number		
20.	Sector	Category		
21.	Total assets	Number		
22.	Total liabiliti...	Number		
23.	Total operating...	Number		

WizWhy1
Main Windc
Summary R
If-Then Rule
Trend Repc
Unexpected
If-and-only-i
Unexpected

IF-THEN RULES REPORT

IF-THEN RULES:

- If **Equity (common)** is -1 193,60 ... 489,50 (average = 64,70)

Then

Cash is not more than 253,31

Rule's probability: **0,995**

The rule exists in **833** records.

Significance Level: Error probability is almost 0

Positive Examples (records' serial numbers):

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10

Negative Examples (records' serial numbers):

122, 319, 463, 693
- If **Total liabilities** is 0,00 ... 1 853,50 (average = 199,42)

Then

Cash is not more than 253,31

Rule's probability: **0,986**

The rule exists in **861** records.

Significance Level: Error probability is almost 0

Positive Examples (records' serial numbers):

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10

Negative Examples (records' serial numbers):

113, 122, 196, 199, 213, 419, 436, 463, 497, 675
- If **Equity (common)** is -155,70 ... 484,90 (average = 44,42)

and **Total liabilities** is 0,00 ... 1 853,50 (average = 107,78)

and **Total operating expenses** is -0,10 ... 321,00 (average = 56,17)

Then

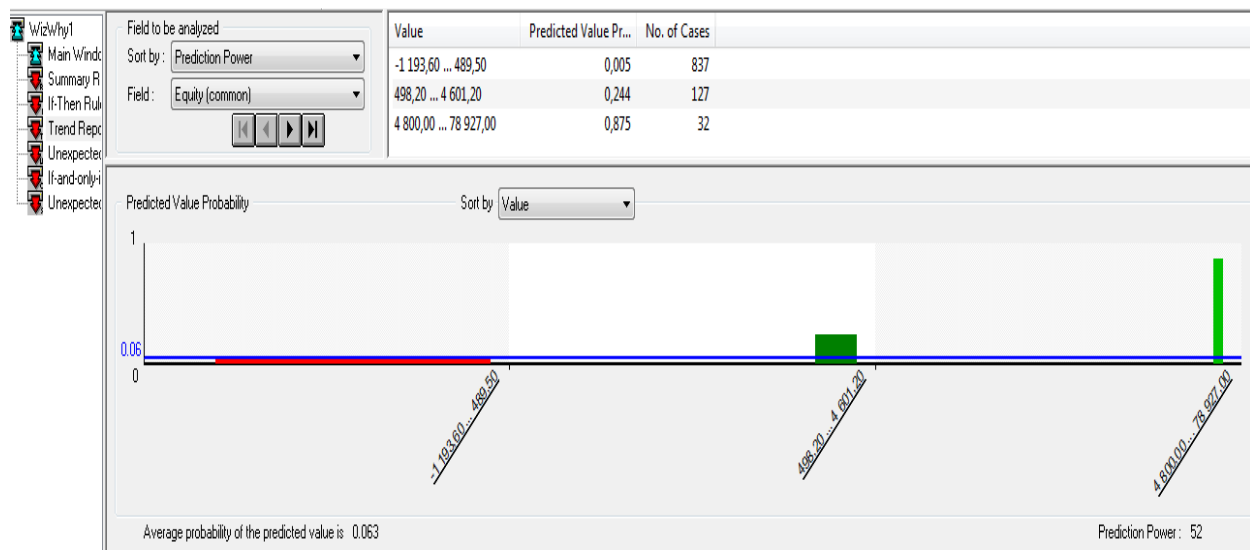
Record: <No Record>

Field	Value
Cash	
Company name	
Cost of goods sold	
Current assets	
Current liabilities	
Dividend	
Equity (common)	
Goodwill and intangibles	
Industry	
Liabilities and equity	
Long-term debt	
Long-term investments	
Net fixed assets	
Net income	
Other long-term assets	

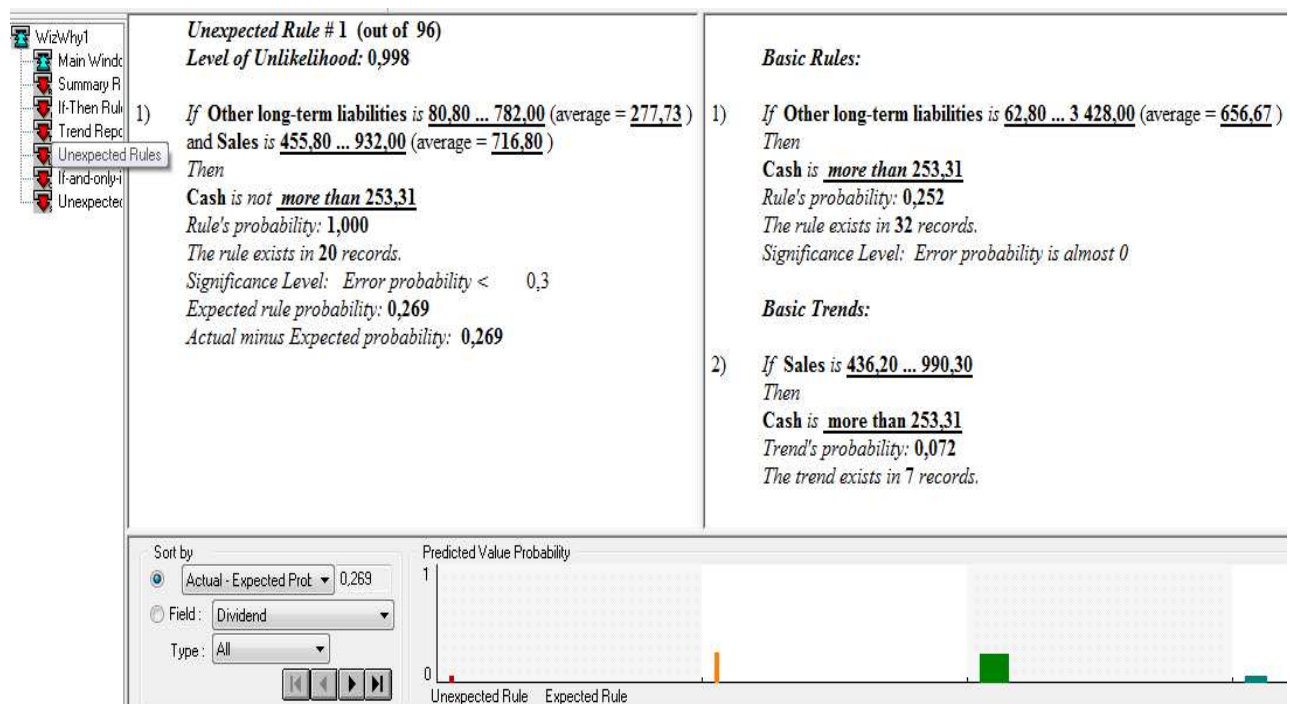
FIELD INDEX

Field	Rule #
Cash	
1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10,	
11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20,	
21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30,	
31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40,	
41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50,	
51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60,	
61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70,	
71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80,	

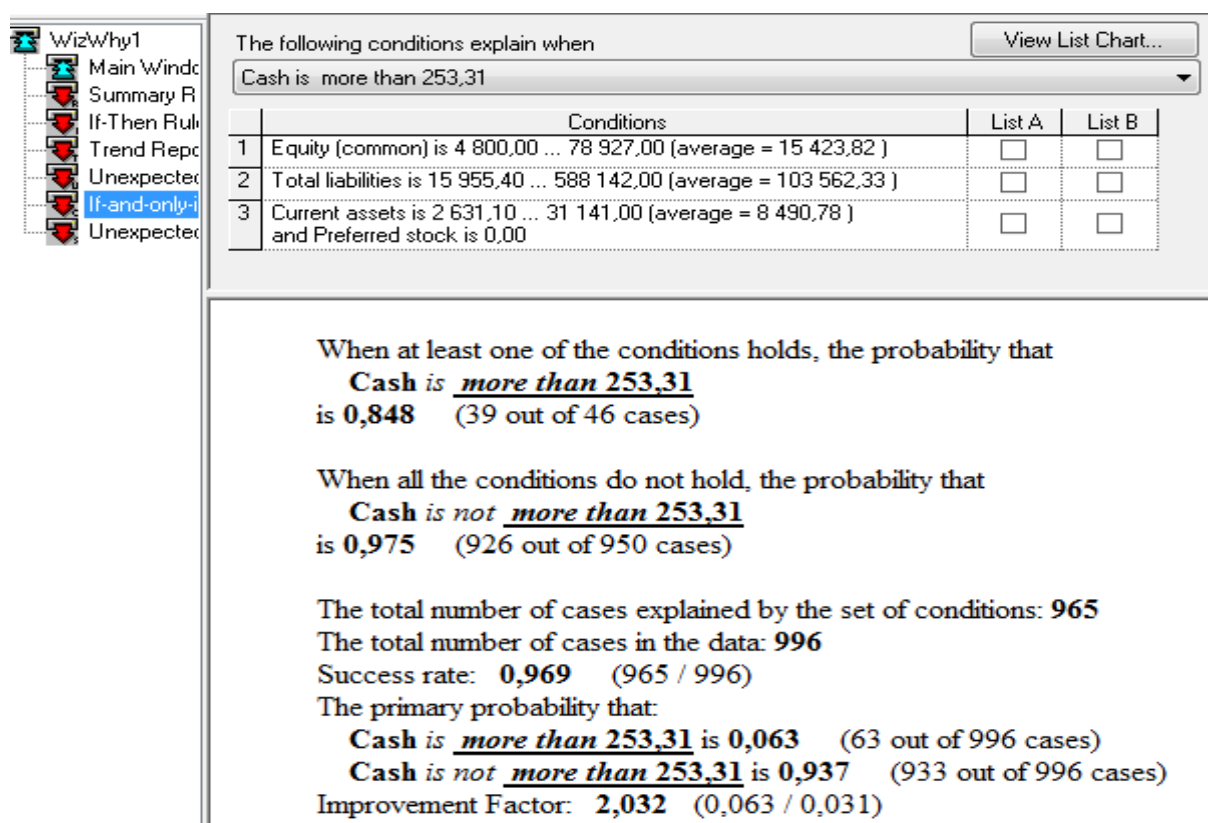
Trend Report



Unexpected Rules



If-and-only-if Rules



Unexpected cases

WizWhy1

- Main Window
- Summary Report
- If-Then Rule
- Trend Report
- Unexpected
- If-and-only-if
- Unexpected

Record: 39

Field	Value
Cash	40,90
Company name	Amerada Hes
Cost of goods sold	4728,10
Current assets	1827,60
Current liabilities	1578,90
Dividend	0,60
Equity (common)	3038,20
Goodwill and intangibles	0,00
Industry	0606 - Oil & G
Liabilities and equity	7727,70
Long-term debt	2286,70
Long-term investments	992,20
Net fixed assets	4051,70
Net income	437,60
Other long-term assets	856,30
Other long-term liabilities	824,00
Preferred stock	0,00
Research and development	261,00
Sales	7461,40
Sector	06 - Energy
Total assets	7727,70
Total liabilities	4689,50
Total operating expenses	6759,50

Prediction: Cash is more than 253,31
Conclusive Prediction's probability: **0,913**

Condition(s) explaining why the case is unexpected.

The following conditions explain when Cash is more than 253,31

When at least one of the conditions holds, the probability that
Cash is not more than 253,31
is **0,978** (929 out of 950 cases)

When all the conditions do not hold, the probability that
Cash is more than 253,31
is **0,913** (42 out of 46 cases)

- Equity (common)** is -1 193,60 ... 489,50 (average = 64,70)
- Sales** is 0,10 ... 430,50 (average = 78,18)
- Cost of goods sold** is 0,00 ... 2 411,00 (average = 218,51)
- Dividend** is 0,00 ... 0,30 (average = 0,02)
and **Other long-term liabilities** is 0,00 ... 61,60 (average = 7,19)
and **Sector** is 09 - Services
- Dividend** is 0,00 ... 0,20 (average = 0,01)
and **Preferred stock** is 0,40 ... 80,60 (average = 17,28)

Liste des sources bibliographiques

1. L. Lebart, A. Morineau, M. Piron (1995). Statistique exploratoire multidimensionnelle, Dunod.
2. Baccini, P. Besse, Data Mining. 1. Exploration statistique, Polycopié de cours. 2002.
3. Bach, F.R., Jordan, M.I., (2006). A probabilistic interpretation of Canonical Correlation Analysis. Tech. Rep. 688, Dept Stat, Univ. California, Berkeley.
4. Forgy, E. W. (1965) Cluster analysis of multivariate data: efficiency with interpretability of classifications. Biometrics 21, 768-769.
5. Härdle, W., Simar L., (2007) Applied Multivariate Statistical Analysis, 2nd edition, Springer.
6. D. Larose, (2003). Des données à la connaissance. Une introduction au data mining, Vuibert.
7. ALAIN B. & PHILIPPE B. Data mining I. Laboratoire de Statistique et Probabilités, Toulouse cedex 4, 2005.
8. G. Saporta, (2005). Probabilités, analyses des données et statistiques , Editions Technip.

9. M. R. Anderberg. Cluster Analysis for Applications. Academic Press, 1973.
10. P. Arabie, L. J. Hubert, and G. De Soete. Clustering and Classification. World Scientific, 1996
11. A. K. Jain and R. C. Dubes. Algorithms for Clustering Data. Prentice Hall, 1988
12. L. Kaufman and P. J. Rousseeuw. Finding Groups in Data: an Introduction to Cluster Analysis. John Wiley & Sons, 1990.
13. Stéphane T. Cours de Data Mining. Université Rennes 1, 2011
14. Jolliffe, I. (2002). Principal Component Analysis (2nd edition ed.). Springer-Verlag.
15. PHILIPPE B. Apprentissage Statistique & Data mining, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, Toulouse, 2006
16. Besse, P. and F. Ferraty (1995). A fixed effect curvilinear model. Computational Statistics 10, 339–351.
17. Breiman, L. (2001). Random forests. Machine Learning 45, 5–32.