Notes sur le calcul de distances en R

1 Calcul des distances à partir des produits scalaires

Si X est la matrice de données associée à un ensemble de n points de \mathbb{R}^p , on a établi dans le chapitre « Positionnement multidimensionnel » que les distances euclidiennnes pouvaient être calculées en s'appuyant sur la matrice des produits scalaire en utilisant la relation

$$D_x^2 = \mathbf{h}_x \mathbf{1}_n' - 2W_x + \mathbf{1}_n \mathbf{h}_x'$$

où $W_x=XX',$ $\mathbf{h}_x=(\|\boldsymbol{x}_1\|^2,\dots,\|\boldsymbol{x}_n\|^2)'$ et $\mathbbm{1}_n$ est le vecteur colonne de dimension n rempli de 1.

Cette relation peut être généralisée au calcul des distances entre un ensemble de n points de \mathbb{R}^p et un ensemble de m points de \mathbb{R}^p . On obtient la relation

$$D_{xy}^2 = \mathbf{h}_x 1_m' - 2W_{xy} + 1_n \mathbf{h}_x'$$

où $W_{xy}=XY',$ $\mathbf{h}_x=(\|\boldsymbol{x}_1\|^2,\ldots,\|\boldsymbol{x}_n\|^2)',$ $\mathbf{h}_y=(\|\boldsymbol{y}_1\|^2,\ldots,\|\boldsymbol{x}_m\|^2)',$ $\mathbbm{1}_n$ est le vecteur colonne de dimension n et $\mathbbm{1}_m$ est le vecteur colonne de dimension m.

Ces deux relations permettent de calculer les distances sans utilisation de boucles dans des logiciels matriciels comme Matlab et R.

2 Exemple de calcul en R

```
# Définition des données X et Y
n <- 4
m <- 3
p <- 2
X <- matrix(sample(1:20,n*p),nrow=n)
Y <- matrix(sample(1:20,m*p),nrow=m)

# Définition des vecteurs h.x, h.y, ones.n et ones.m
h.x <- rowSums(X^2)
h.y <- rowSums(Y^2)
ones.n <- rep(1,n)
ones.m <- rep(1,n)
# Calcul de la matrice des distances au carré entre les points de X
D2x <- h.x%*%t(ones.n) - 2*X %*% t(X) + ones.n%*%t(h.x)</pre>
```

 $D2xy \leftarrow h.x\%*\%t(ones.m) - 2*X \%*\% t(Y) + ones.n\%*\%t(h.y)$

Calcul de la matrice des distances au carré entre les points de X et les points de Y