Algèbre linéaire pour les statistiques

Joseph Salmon Université de Montpellier



## Préface

## Table des matières

Ι	Rappels	4
1	Matrices classiques	5
	1.1 Matrice orthogonale	5
	1.2 Matrice $J_n$ et recentrage	5
	1.3 Matrices stochastiques, doublement stochastiques	7
2	Inversion de matrices	8
	2.1 Inversion des matrices par blocs	8
3	Décompositions classiques	11
	3.1 Décomposition spectrale	11
	3.2 Décomposition en valeurs singulières (SVD)	11
II	Outils pour l'ANOVA	12
4	Matrice pour l'analyse de la variance	13
	4.1 Moindres carrées et contraintes	14
5	Produit de Kronecker	17
	5.1. Introduction et propriétés	17

Première partie

Rappels

## 1

## Matrices classiques

#### 1.1 Matrice orthogonale

**Définition 1.1.** Une matrice  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  est dite orthogonale si elle vérifie la propriété suivante

$$U^{\top}U = UU^{\top} = \mathrm{Id}_n \quad . \tag{1.1}$$

Une telle matrice U peut s'écrire en colonne  $U=\left[u_1,\ldots,u_n\right]$  et ses colonnes satisfont les relations

$$\forall i \in [[1, n]], \ u_i^\top u_j = \delta_{i,j} \ ,$$
 (1.2)

où le symbole de Kronecker  $\delta$  est défini pour tout  $(i,j) \in [[1,n]]$  par

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j, \\ 0, & \text{si } i \neq j. \end{cases}$$
 (1.3)

Ainsi les vecteurs  $u_1, \ldots, u_n$  forment une base orthonormale.

#### 1.2 Matrice $J_n$ et recentrage

Soit  $\mathbb{1}_n \in \mathbb{R}^n$  le vecteur de taille n ne contenant que des 1. On définit alors la matrice  $J_n$  par

$$J_n = \mathbb{1}_n \mathbb{1}_n^\top \in \mathbb{R}^n \ . \tag{1.4}$$

**Propriétés :** La matrice  $J_n$  est symétrique définie positive :

$$J_n^2 = nJ_n . (1.5)$$

On associe souvent aussi le projecteur :  $\bar{J}_n$  défini par  $\bar{J}_n = \frac{1}{n}J_n$ . Le projecteur orthogonal associé  $\bar{C}_n = \mathrm{Id}_n - \bar{J}_n$  est la matrice que l'on appelle la *matrice de centrage* car pour tout vecteur  $x \in \mathbb{R}^n$  on observe que

$$\overline{C}_n x = (x_1 - \overline{x}_n, \dots, x_n - \overline{x}_n) . \tag{1.6}$$

Décomposition spectrale :

$$J_n = H_n^{\top} \operatorname{diag}(n, 0, \dots, 0) H_n \tag{1.7}$$

$$\bar{J}_n = H_n^{\top} \operatorname{diag}(1, 0, \dots, 0) H_n$$
 (1.8)

où  $H_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  est la matrice de Helmert, c'est-à-dire la matrice orthogonale définie par :

$$H_n = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{1}{\sqrt{n}} \\ \frac{1}{\sqrt{n}} & \frac{-1}{\sqrt{n}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-2}{\sqrt{6}} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{-3}{\sqrt{12}} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} & \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} & \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} & \frac{-(n-1)}{\sqrt{n(n-1)}} \end{bmatrix}.$$

**Propriétés :** Pour tout  $(a, b, a', b') \in \mathbb{R}^4$ , on a

$$(a \operatorname{Id}_{n} + b J_{n})(a' \operatorname{Id}_{n} + b' J_{n}) = aa' \operatorname{Id}_{n} + (ab' + a'b + nbb') J_{n},$$
(1.9)

$$(a\operatorname{Id}_n + bJ_n)^{-1} = \frac{1}{a}\left(\operatorname{Id}_n - \frac{b}{a+nb}J_n\right), \quad \text{pour } a \neq 0 \text{ et } a \neq -nb,$$
 (1.10)

$$a \operatorname{Id}_n + b J_n = H_n^{\top} \operatorname{diag}(a + nb, \underbrace{a, \dots, a}_{(n-1) \operatorname{fois}}) H_n, \quad (\operatorname{d\'{e}comp. spectrale})$$
 (1.11)

$$\det(a \operatorname{Id}_n + b J_n) = a^{n-1}(a + nb)$$
(1.12)

**Exemple 1.2.** Prenons un modèle à effet aléatoire pour une catégorie à K modalités  $C_1, \ldots, C_K$  et n observations (avec  $n = n_1 + \cdots + n_K$ ):

$$y = \mu \mathbb{1}_n + \sum_{k=1}^K \mathbb{1}_{C_k} a_k + \varepsilon .$$
 (1.13)

avec  $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\varepsilon}^2 \operatorname{Id}_n)$  et  $a \sim \mathcal{N}(0, \sigma_a^2 \operatorname{Id}_K)$ . Dans ce cas la matrice de covariance de  $y \in \mathbb{R}^n$ 

s'écrit :

$$Var(y) = Var(\varepsilon) + Var(\begin{bmatrix} \mathbb{1}_{C_1} & \cdots & \mathbb{1}_{C_K} \end{bmatrix} a)$$
(1.14)

$$= \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n} + \left[ \mathbb{1}_{C_{1}} \cdots \mathbb{1}_{C_{K}} \right] \operatorname{Var}(aa^{\top}) \left[ \mathbb{1}_{C_{1}} \cdots \mathbb{1}_{C_{K}} \right]^{\top}$$
(1.15)

$$= \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n} + \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{C_{1}} \cdots \mathbb{1}_{C_{K}} \end{bmatrix} \sigma_{a}^{2} \operatorname{Id}_{K} \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{C_{1}} \cdots \mathbb{1}_{C_{K}} \end{bmatrix}^{\top}$$

$$(1.16)$$

$$Var(y) = \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n} + \sigma_{a}^{2} \begin{bmatrix} J_{n_{1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & J_{n_{2}} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & J_{n_{K-1}} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & J_{n_{K}} \end{bmatrix}$$
(1.17)

$$Var(y) = \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n} + \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{C_{1}} & \cdots & \mathbb{I}_{C_{K}} \end{bmatrix} \sigma_{a} \operatorname{Id}_{K} \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{C_{1}} & \cdots & \mathbb{I}_{C_{K}} \end{bmatrix}$$

$$Var(y) = \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n} + \sigma_{a}^{2} \begin{bmatrix} J_{n_{1}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & J_{n_{2}} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & J_{n_{K-1}} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & J_{n_{K}} \end{bmatrix}$$

$$Var(y) = \begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{1}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{2}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{2}} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{K-1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{K-1}} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{K}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{K}} \end{bmatrix}$$

$$var(y) = \begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{1}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{K-1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{K-1}} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{K}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{K}} \end{bmatrix}$$

$$var(y) = \begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{1}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{K-1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{K-1}} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{K}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{K}} \end{bmatrix}$$

$$var(y) = \begin{bmatrix} \sigma_{\varepsilon}^{2} \operatorname{Id}_{n_{1}} + \sigma_{a}^{2} J_{n_{1}} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots$$

On peut donc en déduire avec Eq. (1.10)

$$(\operatorname{Var}(y))^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_{\varepsilon}^{2}} \left( \operatorname{Id}_{n_{1}} - \frac{\sigma_{a}^{2}}{\sigma_{\varepsilon}^{2} + n_{1} \sigma_{a}^{2}} J_{n_{1}} \right) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{\sigma_{\varepsilon}^{2}} \left( \operatorname{Id}_{n_{K}} - \frac{\sigma_{a}^{2}}{\sigma_{\varepsilon}^{2} + n_{K} \sigma_{a}^{2}} J_{n_{K}} \right) \end{bmatrix}$$
(1.19)

#### Matrices stochastiques, doublement stochastiques

SENETA (Non-negative matrices and Markov chains)

Bhatia (Matrix analysis)

#### Inversion de matrices

#### 2.1 Inversion des matrices par blocs

Pour toutes matrices  $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_1}$ ,  $B \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$ ,  $C \in \mathbb{R}^{n_2 \times n_1}$ ,  $D \in \mathbb{R}^{n_2 \times n_2}$  telles que les matrices  $\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$ , A et D sont inversibles on a les relations suivantes :

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} + A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1} \\ -(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & -(A - BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1} & D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1} + D^{-1} \end{bmatrix} .$$

Conséquence : les déterminants suivants sont égaux :

$$\left| \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \right| = |A||D - CA^{-1}B| = |D||A - BD^{-1}C|.$$

De plus si AC = CA monter qu'alors  $\begin{vmatrix} A & B \\ C & D \end{vmatrix} = |AD - CB|$ .

Identité de Woodbury sous les mêmes hypothèses :

$$(A + BDC)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}B(D^{-1} + CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} . (2.1)$$

La formule précédente donne la relation suivante pour des scalaires  $x \neq 0$  et  $\delta \neq 0$ :

$$\frac{1}{x+\delta} = \frac{1}{x} - \left(\frac{1}{x}\right)^2 \cdot \left(\frac{1}{\delta} + \frac{1}{x}\right)^{-1} . \tag{2.2}$$

Enfin relation suivante pour des vecteurs  $u \in \mathbb{R}^{n_1}$  et  $v \in \mathbb{R}^{n_1}$ :

$$(A + uv^{\top})^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^{\top}A^{-1}}{1 + v^{\top}A^{-1}u} . {(2.3)}$$

Rem: On appelle complément de Schur du bloc D de la matrice M, la matrice de dimension  $n_1 \times n_2$  suivante :  $A - BD^{-1}C$ , qu'on note parfois M/D.

Démonstration. Premier point : commençons par appliquer un premier pivot (par bloc) sur notre matrice, en éliminant la matrice "C" en bas à gauche :

$$\begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ -CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} .$$

On élimine de la même manière le bloc en haut à droite :

$$\begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ -CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & -A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & -A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} .$$

Remarquons alors que l'on peut facilement inverser les matrices triangulaires par blocs :

$$\begin{bmatrix} I_{n_1} & A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & -A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} = I_{n_1+n_2}$$
 
$$\begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ -CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} = I_{n_1+n_2} .$$

Ainsi en inversant les matrices diagonales, on obtient la factorisation LDU (Low triangular, Diagonal, Upper triangular)

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} .$$
(2.4)

En inversant les deux côtés

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I_{n_1} & A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix}^{-1} \\
= \begin{bmatrix} I_{n_1} & -A^{-1}B \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^{-1} & 0 \\ 0 & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ -CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} \\
= \begin{bmatrix} A^{-1} & -A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1} \\ 0 & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ -CA^{-1} & I_{n_2} \end{bmatrix} \\
= \begin{bmatrix} A^{-1} + A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1} \\ -(D - CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix} .$$
(2.5)

On procède de même pour la seconde relation et on obtient la factorisation UDL (Upper triangular, Diagonal, Lower Triangular) :

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{n_1} & BD^{-1} \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ D^{-1}C & I_{n_2} \end{bmatrix} .$$
 (2.6)

De nouveau on peut inverser les deux membres :

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ D^{-1}C & I_{n_2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} I_{n_1} & BD^{-1} \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix}^{-1} 
= \begin{bmatrix} I_{n_1} & 0 \\ -D^{-1}C & I_{n_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{n_1} - BD^{-1} \\ 0 & I_{n_2} \end{bmatrix} 
= \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & -(A - BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1} & D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1} + D^{-1} \end{bmatrix} .$$
(2.7)

Second point : il suffit de calculer les déterminants dans les relations données par les Équations (2.4) et (2.6).

## 3

## Décompositions classiques

#### 3.1 Décomposition spectrale

Horn et Johnson (*Topics in matrix analysis*) Golub et van Loan (*Matrix computations*) Strang (*Introduction to linear algebra*)

#### 3.1.1 Valeurs propres du laplacien sur graphe

http://www.math.ucsd.edu/~fan/research/cb/ch1.pdf

#### 3.2 Décomposition en valeurs singulières (SVD)

# Deuxième partie Outils pour l'ANOVA

## Matrice pour l'analyse de la variance

Plan d'expériences : on observe K classes  $C_1,\ldots,C_K$  (e.g., les variétés de blé sur une parcelle) et n observations d'un phénomène (e.g., le rendement de la variété) sont consignées. On fait l'hypothèse que les classes  $C_k$  sont disjointes et forment une partition des observations :  $\bigcup_{k=1}^K C_k = [\![1,n]\!]$  et  $\forall (k,k') \in [\![1,K]\!], C_k \cap C_{k'} = \emptyset$ . On appelle cet encodage l'encodage "un-chaud" ( $[\![m]\!]$ : one-hot) ou par variable indicatrice, ou encore par variable factice ( $[\![m]\!]$ : dummy variable). Enfin on suppose que la cardinalité de chaque classe  $C_k$  est  $n_k$ , et donc que  $n = \sum_{k=1}^K n_k$ .

Le modèle de l'ANOVA peut alors s'écrire, sous l'hypothèse gaussienne que pour tout  $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$ ,  $\varepsilon_i \overset{i.i.d.}{\sim} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$  et pour tout  $(i, k) \in \llbracket 1, n \rrbracket \times \llbracket 1, K \rrbracket$ ,

$$y_i = \mu + a_k \delta_{i,C_k} + \varepsilon_i \tag{4.1}$$

où 
$$\delta_{i,C_k} = \begin{cases} 1, & \text{si } i \in C_k \\ 0, & \text{si } i \notin C_k \end{cases}$$
.

Interprétation : les  $a_k$  sont les coefficients qui correspondent au niveau d'influence de la  $k^{\rm e}$  classe

$$y = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbb{1}_n \ \mathbb{1}_{C_1} \dots \ \mathbb{1}_{C_K} \end{bmatrix}}_{X} \underbrace{\begin{bmatrix} \mu \\ a_1 \\ \vdots \\ a_K \end{bmatrix}}_{\mathcal{B}} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_K \end{bmatrix} . \tag{4.2}$$

**Remarque 4.1.** La matrice  $X \in \mathbb{R}^{n \times K+1}$  est de rang K car  $\mathbb{1}_n = \sum_{k=1}^K \mathbb{1}_{C_k}$  et les vecteurs  $\mathbb{1}_{C_1}, \dots, \mathbb{1}_{C_K}$  sont linéairement indépendants et générateurs (cela est vrai car les classes  $C_k$  sont disjointes et forment une partition de l'espace :  $\bigcup_{k=1}^K C_k = [\![1,n]\!]$ ). Ainsi on ne peut pas appliquer la formule  $(X^\top X)^{-1}X^\top y$  pour obtenir une solution des moindres carrés : en effet  $\operatorname{rg}(X) = \operatorname{rg}(X^\top X) = K < K + 1$  mais  $X^\top X \in \mathbb{R}^{(K+1) \times (K+1)}$ .

On peut expliciter la matrice de Gram  $X^{T}X$  dans ce contexte :

$$X^{\top}X = \begin{bmatrix} n & n_1 & \cdots & \cdots & n_K \\ n_1 & n_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & n_{K-1} & 0 \\ n_K & 0 & \cdots & 0 & n_K \end{bmatrix}.$$

#### 4.1 Moindres carrées et contraintes

On cherche pour l'estimation des moindres carrés à résoudre le problème suivant, avec des contraintes sur les  $a_k$ , ce qui correspond à

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^{K+1}} \frac{1}{2} \|y - X\beta\|^2 \quad , \tag{4.3}$$

t.q. 
$$\beta = (\mu, a_1, \dots, a_K)^{\top}$$
 et  $\sum_{k=1}^{K} c_k a_k = 0$ , (4.4)

où le vecteur  $c=(c_1,\ldots,c_K)^{\top}\in\mathbb{R}^K$  est un vecteur encodant les contraintes choisies telles que  $\sum_{k=1}^K c_k \neq 0$ . On distingue trois types de contraintes :

- 1. Le cas où l'on choisit une classe  $C_{k_0}$  comme référence. Cela revient à prendre  $c=(0,\ldots,\underbrace{1}_{\text{en }k_0\text{e position}},\ldots,0)$ , ce qui revient à la contrainte " $a_{k_0}=0$ ".
- 2. Le cas où l'on choisit des contributions des classes centrées autour de la moyenne  $c=(1,\ldots,1)$ , ce qui revient à la contrainte  $\sum_{k=1}^K a_k=0$ .
- 3. Le cas où l'on choisit des contributions pondérées des classes centrées autour de la moyenne pondérée  $c=(n_1,\ldots,n_K)$ , ce qui revient à la contrainte  $\sum_{k=1}^K n_k a_k = 0$ .

Formation du Lagrangien :

$$\mathcal{L}(\beta, \gamma) = \frac{1}{2} \|y - X\beta\|^2 + \gamma a^{\mathsf{T}} c . \tag{4.5}$$

Condition nécessaire du premier ordre :

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\beta, \gamma)}{\partial \beta} = 0 \iff X^{\top}(X\beta - y) + \gamma c = 0$$
(4.6)

$$\iff X^{\top} X \beta + \gamma c = X^{\top} y \tag{4.7}$$

$$\iff \begin{bmatrix} n & n_{1} & \cdots & \cdots & n_{K} & 0 \\ n_{1} & n_{1} & 0 & \cdots & 0 & c_{1} \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & n_{K-1} & 0 & c_{K-1} \\ n_{K} & 0 & \cdots & 0 & n_{K} & c_{K} \\ 0 & c_{1} & \cdots & c_{K-1} & c_{K} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta \\ \gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X^{\top} y \\ 0 \end{bmatrix} . \tag{4.8}$$

Tout d'abord il est facile de vérifier que 
$$X^{\top}y = \begin{bmatrix} n\bar{y}_n \\ n_1\bar{y}_{C_1} \\ \vdots \\ n_K\bar{y}_{C_K} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i\in C_1} y_i \\ \vdots \\ \sum_{i\in C_K} y_i \end{bmatrix}$$
 avec la notation

 $\bar{y}_{C_k} = \frac{1}{n_k} \sum_{i \in C_k} \text{ pour tout } k \in \llbracket 1, K 
rbracket.$ 

En multipliant à gauche par la matrice  $\mathrm{diag}(\frac{1}{n},\frac{1}{n_1},\dots,\frac{1}{n_K},1)$  le système précédent on obtient :

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{n_{1}}{n} & \cdots & \cdots & \frac{n_{K}}{n} & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \frac{c_{1}}{n_{1}} \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 & \frac{c_{K-1}}{n_{K-1}} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \frac{c_{K}}{n_{K}} \\ 0 & c_{1} & \cdots & c_{K-1} & c_{K} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ a \\ \gamma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{y}_{n} \\ \bar{y}_{C_{1}} \\ \vdots \\ \bar{y}_{C_{K}} \\ 0 \end{bmatrix} . \tag{4.9}$$

En prenant les équations de la ligne 2 à K+1, on en déduit les équations suivantes :

$$\begin{cases}
\hat{a}_{K} = \bar{y}_{C_{K}} - \hat{\mu} - \frac{c_{K}}{n_{K}} \gamma \\
\vdots \\
\hat{a}_{k} = \bar{y}_{C_{k}} - \hat{\mu} - \frac{c_{k}}{n_{k}} \gamma \\
\vdots \\
\hat{a}_{1} = \bar{y}_{C_{1}} - \hat{\mu} - \frac{c_{1}}{n_{k}} \gamma
\end{cases}$$
(4.10)

Avec la première équation du système précédent, i.e.,

$$\hat{\mu} + \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} a_k = \bar{y}_n \tag{4.11}$$

et en sommant avec les poids du système d'équation précédent, on obtient :

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} \hat{a}_k = \sum_{k=1}^{K} \frac{n_k}{n} \bar{y}_{C_k} - \hat{\mu} + \frac{\gamma}{n} \sum_{k=1}^{K} c_k$$
 (4.12)

ce qui implique que

$$\frac{\gamma}{n} \sum_{k=1}^{K} c_k = 0 . {(4.13)}$$

Rappelant la condition  $\sum_{k=1}^K c_k \neq 0$ , on en déduit que  $\gamma = 0$ .

Enfin, en sommant avec les poids  $c_K, \ldots, c_1$  les sysème d'équations dans (4.10), on obtient :

$$0 = \sum_{k=1}^{K} c_k \hat{a}_k = \sum_{k=1}^{K} c_k \bar{y}_{C_k} - \sum_{k=1}^{K} c_k \hat{\mu} - \sum_{k=1}^{K} \frac{c_K^2}{n_K} \gamma = \sum_{k=1}^{K} c_k \bar{y}_{C_k} - \sum_{k=1}^{K} c_k \hat{\mu}$$

$$\iff \hat{\mu} = \frac{\sum_{k=1}^{K} c_k \bar{y}_{C_K}}{\sum_{k=1}^{K} c_k}$$

On obtient donc comme solution du système initial

$$\begin{cases}
\hat{\mu} &= \frac{\sum_{k=1}^{K} c_k \bar{y}_{C_K}}{\sum_{k=1}^{K} c_k} \\
\hat{a}_1 &= \bar{y}_{C_1} - \hat{\mu} \\
\vdots \\
\hat{a}_K &= \bar{y}_{C_K} - \hat{\mu} \\
\vdots \\
\hat{a}_K &= \bar{y}_{C_K} - \hat{\mu}
\end{cases}$$
(4.14)

On peut maintenant retourner sur les trois cas possibles :

1. 
$$c = (0, \ldots, \underbrace{1}_{\text{en } k_0^{\text{e}} \text{ position}}, \ldots, 0)$$
:

$$\begin{cases} \hat{\mu} &= \bar{y}_{C_{k_0}} \quad \text{(moyenne de la modalité de référence)} \\ \hat{a}_1 &= \bar{y}_{C_1} - \bar{y}_{C_{k_0}} \\ \vdots &&& \\ \hat{a}_k &= 0 \\ \vdots &&& \\ \hat{a}_K &= \bar{y}_{C_K} - \bar{y}_{C_{k_0}} \end{cases} \tag{4.15}$$

2. Le cas où c = (1, ..., 1):

$$\begin{cases} \hat{\mu} &= \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K} \bar{y}_{C_{K}} \quad \text{(moyenne des moyennes par classes)} \\ \hat{a}_{1} &= \bar{y}_{C_{1}} - \hat{\mu} \\ \vdots \\ \hat{a}_{k} &= \bar{y}_{C_{k}} - \hat{\mu} \\ \vdots \\ \hat{a}_{K} &= \bar{y}_{C_{K}} - \hat{\mu} \end{cases}$$

$$(4.16)$$

3. Le cas où  $c = (n_1, ..., n_K)$ :

$$egin{aligned} \hat{\mu} &= ar{y}_n \quad ( ext{moyenne des observations}) \ \hat{a}_1 &= ar{y}_{C_1} - \hat{\mu} \ dots \ \hat{a}_k &= ar{y}_{C_k} - \hat{\mu} \ dots \ \hat{a}_K &= ar{y}_{C_K} - \hat{\mu} \end{aligned}$$

**Exercice 4.1.** Calculer les conditionnements et choisir numériquement la meilleure contrainte possible.

#### Produit de Kronecker

#### 5.1 Introduction et propriétés

**Définition 5.1.** Soient  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  et  $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Leur produit tensoriel ou produit de Kronecker est la matrice  $A \otimes B \in \mathbb{R}$ mp  $\times$  nq, définie par blocs successifs de taille  $p \times q$ , le bloc d'indice i, j valant  $a_{i,i}B$ , ou de manière équivalente :

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{1,1}B & \cdots & a_{1,n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}B & \cdots & a_{m,n}B \end{bmatrix}$$
 (5.1)

ou encore

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & a_{1,1}b_{1,2} & \cdots & a_{1,1}b_{1,q} & \cdots & \cdots & a_{1,n}b_{1,1} & a_{1,n}b_{1,2} & \cdots & a_{1,n}b_{1,q} \\ a_{1,1}b_{2,1} & a_{1,1}b_{2,2} & \cdots & a_{1,1}b_{2,q} & \cdots & \cdots & a_{1,n}b_{2,1} & a_{1,n}b_{2,2} & \cdots & a_{1,n}b_{2,q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,1}b_{p1} & a_{1,1}b_{p,2} & \cdots & a_{1,1}b_{p,q} & \cdots & \cdots & a_{1,n}b_{p1} & a_{1,n}b_{p,2} & \cdots & a_{1,n}b_{p,q} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \ddots \\ a_{m,1}b_{1,1} & a_{m,1}b_{1,2} & \cdots & a_{m,1}b_{1,q} & \cdots & \cdots & a_{m,n}b_{1,1} & a_{m,n}b_{1,2} & \cdots & a_{m,n}b_{1,q} \\ a_{m,1}b_{2,1} & a_{m,1}b_{2,2} & \cdots & a_{m,1}b_{2,q} & \cdots & \cdots & a_{m,n}b_{2,1} & a_{m,n}b_{2,2} & \cdots & a_{m,n}b_{2,q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}b_{p1} & a_{m,1}b_{p,2} & \cdots & a_{m,1}b_{p,q} & \cdots & \cdots & a_{m,n}b_{p1} & a_{m,n}b_{p,2} & \cdots & a_{m,n}b_{p,q} \end{bmatrix}$$

$$(5.2)$$

**Propriétés et liens avec les opérations usuelles :** Prenons A, B, C et D quatre matrices quelconques. Alors les relations suivantes sont satisfaites :

$$A \otimes (B+C) = A \otimes B + A \otimes C, \tag{5.3}$$

$$(B+C)\otimes A = B\otimes A + C\otimes A, \tag{5.4}$$

$$(\mathfrak{J}A) \otimes B = A \otimes (kB) = \mathfrak{J}(A \otimes B) \quad (pour \, \mathfrak{J} \in \mathbb{R}), \tag{5.5}$$

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C), \tag{5.6}$$

$$A \otimes 0 = 0 \otimes A = 0, \tag{5.7}$$

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$$
 (quand AC et BD existent), (5.8)

$$(A \otimes B)^{\top} = (A^{\top} \otimes B^{\top}), \tag{5.9}$$

$$[A_1 \ A_2] \otimes B = [A_1 \otimes B \ A_2 \otimes B] \quad (pour \ des \ matrices \ concaténées),$$
 (5.10)

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \quad (pour A et B inversibles). \tag{5.11}$$

**Propriétés spectrales** Prenons des éléments spectraux des matrices  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  et  $B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ , i.e., Ax = ax et  $By = \beta y$ , alors

$$(A \otimes B)(x \otimes y) = a\beta(x \otimes y) . (5.12)$$

et par conséquent si l'on prend  $\{a_1, \ldots, a_n\}, \{x_1, \ldots, x_n\}$  et  $\{\beta_1, \ldots, \beta_m\}, \{y_1, \ldots, y_m\}$  les couples valeurs/vecteurs propres des matrices A et B, alors la matrice  $A \otimes B$  a pour éléments propres  $\{a_i\beta_i, i=1,\ldots,n,j=1,\ldots,m\}$  et  $\{x_iy_j, i=1,\ldots,n,j=1,\ldots,m\}$ . Ainsi

$$tr(A \otimes B) = tr(A) tr(B), \tag{5.13}$$

$$\det(A \otimes B) = \det(A)^m \det(B)^n, \tag{5.14}$$

$$rg(A \otimes B) = rg(A) rg(B). \tag{5.15}$$

#### References

**CLARKE** (*Linear models*: the theory and application of analysis of variance)

SEARLE, CASELLA et McCulloch (Variance components)

### Bibliographie

- Bhatia, R. *Matrix analysis*. T. 169. Graduate Texts in Mathematics. New York: Springer-Verlag, 1997 (p. 7).
- CLARKE, B. R. Linear models: the theory and application of analysis of variance. T. 634. John Wiley & Sons, 2008 (p. 18).
- Golub, G. H. et C. F. van Loan. *Matrix computations*. Fourth. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2013, p. xiv+756 (p. 11).
- HORN, R. A. et C. R. Johnson. *Topics in matrix analysis*. Corrected reprint of the 1991 original. Cambridge: Cambridge University Press, 1994, p. viii+607 (p. 11).
- SEARLE, S. R., G. CASELLA et C. E. McCulloch. *Variance components*. T. 391. John Wiley & Sons, 2009 (p. 18).
- SENETA, E. *Non-negative matrices and Markov chains*. Springer Series in Statistics. New York: Springer, 2006, p. xvi+287 (p. 7).
- Strang, G. *Introduction to linear algebra*. 5th edition. Wellesley, MA: Wellesley-Cambridge Press, 2016, p. x + 574 (p. 11).