Analyse discriminante:Methode du type plus proches voisins utilisant un pretraitement des donnees

F. Bonneau, Jean-Marie Proth

INRIA
CENTRE DE ROCQUENCOURT

Institut National
de Recherche
en Informatique
et en Automatique

Domaine de Voluceau
Rocquencourt
B.P. 105
78153 Le Chesnay Cedex
France
Tél. (3) 954 90 20

Rapports de Recherche

N° 440

ANALYSE DISCRIMINANTE : MÉTHODE DU TYPE PLUS PROCHES VOISINS UTILISANT UN PRÉTRAITEMENT DES DONNÉES

Fabrice BONNEAU
Jean-Marie PROTH

Septembre 1985

ANALYSE DISCRIMINANTE :

METHODE DU TYPE PLUS PROCHES VOISINS

UTILISANT UN PRETRAITEMENT DES DONNEES

Fabrice BONNEAU *

Jean-Marie PROTH **

* : INRIA, Projet SAGEP, Domaine de Voluceau, ROCQUENCOURT B.P. 105, 78153 LE CHESNAY CEDEX

** : INRIA, Projet SAGEP, Château du Montet, 54500 VANDOEUVRE

RESUME

Dans la suite, nous proposons une méthode d'analyse discriminante essayant de concilier les avantages d'une méthode géométrique et d'une méthode par voisinage.

Dans la première partie nous présentons un algorithme de prétraitement des données, permettant d'obtenir des régions homogènes et connexes.

Nous proposons ensuite une règle de décision, s'appuyant sur cette nouvelle structure des données, tantôt géométrique tantôt du type plus proche voisin.

Nous décrivons enfin la procédure particulière "plus proche voisin" que nous utilisons.

ABSTRACT

In the following, we propose a discriminant analysis method which tries to conciliate advantages of a geometrical method and of a nearest neighbour method.

In the first part, we present a data preprocessing algorithm in order to find homogeneous and connex regions.

Getting from the new datas structure, we propose a decision rule, sometimes geometrical, sometimes using a particular procedure of nearest neighbours.

I - RAPPELS

Nous nous intéressons ici à l'aspect prédictif de l'analyse discriminante et non à l'aspect descriptif. Ainsi, nous supposons connu l'ensemble des prédicteurs que l'on à pu obtenir par sélection pas à pas, par analyse factorielle discriminante ou par n'importe quelle autre méthode.

I - 1 LE MODELE

Soit donc :

- E : une population d'individus, éventuellement infinie, chacun d'eux étant défini par p variables quantitatives (prédicteurs).
- Une variable qualitative w à k modalités connues à priori sur un sous-ensemble fini B de E et que l'on désire prédire sur l'ensemble E tout entier. B est appelé population de Base. La variable w partitionne donc l'ensemble B en m classes A1,...,Am.

On appelle $Cr = \{x \in E,\ w(x) \in r\}$ pour $r = 1,\ldots,m$

On aura alors $Ar = Cr \cap B$

Une règle d'affectation D sera une application de E-B dans (1,...,m) telle que D(x) = r représentera la décision d'affecter x à Cr.

I - 2 METHODES GEOMETRIQUES

On désigne par Gr r = 1,..., , les centres de gravité respectifs des ensembles Ar. On se donne une métrique M sur E de sorte que

$$d(x,y) = {}^t(x-y)\ M\ (x-y)$$

définisse une distance dans E.

On peut proposer comme règle d'affectation D(x) = r0 où l'on a :

$$d(x,G_{1_0}) = \inf_{r=1,\ldots m} \{ d(x,Gr) \}$$

Remarque : La métrique peut dépendre de r.

CHOIX DE LA METRIQUE

Il est toujours possible de prendre la distance usuelle mais on démontre que le meilleur choix est

$$dr(x,Gr) = {}^t(x-Gr)\ Mr(x-Gr)$$

ou

$$Mr = (\det(Vr))^{1/p}.Vr^{-1}$$

V est la matrice variance-covariance associée à Ar.

Cette distance tient compte de la forme des ensembles Ar. En effet l'ensemble

$$\{x/dr(x,Gr) = RO\}$$

est, dans le cas de la dimension 2, une ellipse de centre Gr, de grand axe, l'axe principal d'inertie.

Ainsi si

$$RO = \underset{y \in Ar}{Max} \{dr(y,Gr)\} \quad \text{alors } dr(x,Gr) < RO$$

peut être considéré comme une inéquation de Ar.

La distance dr s'appelle distance de Mahalonobis associée à la population Ar.

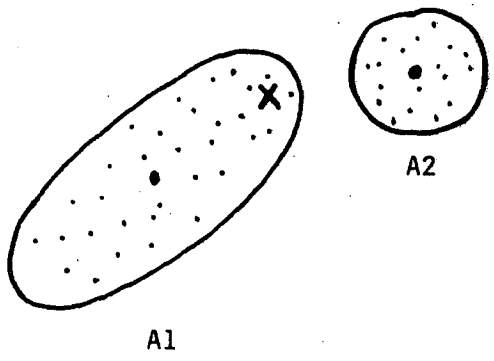
REMARQUE

Si l'on souhaite effectuer des calculs plus simples, il est possible de prendre

$$Mr = (var(x1) \ldots var(xp))^{1/p} \; diag(1/var(xi),\ i = 1,p)$$

On démontre que cette métrique est la meilleure métrique associée à une matrice diagonale répondant à la question.

EXEMPLE

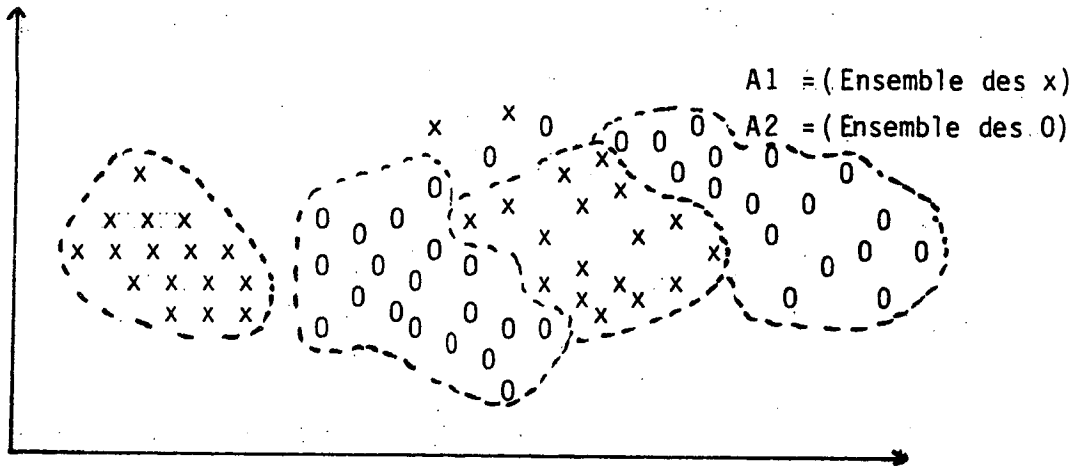


Avec la distance de mahalanobis, x sera affecté à sa classe naturelle (A1), avec la distance euclidienne il sera affecté à A2.

INCONVENIENTS DE LA METHODE

Cette méthode sera efficace si les ensembles Ar sont géométriquement discernables, c'est-à-dire si ils sont connexes et non mélangés. En effet, l'ensemble des prédicteurs peut-être bien choisi sans pour autant garantir ces deux conditions.

Soit par exemple pour q = 2, p = 2 :



Les ensembles A1 et A2 sont tous deux formés de deux régions géométriques et d' une zone mélangée : l'affectation géométrique sera catastrophique.

I - 3 METHODE PAR VOISINAGE

Lorsqu'on désire affecter $x \in E$, on calcule ses k plus proches voisins dans B où k est un entier donné à priori. On affecte ensuite à la majorité : si les k plus proches voisins de x sont $V = \{x1, x2, \ldots, xk\}$ on décide d'affecter x à r0 si

$$\text{card}\,(V \cap Ar0) = \max_{r=1,m} \{\text{card}\,(V \cap Ar)\}$$

La distance choisie pour calculer les plus proches voisins sera la plupart du temps la distance euclidienne, même si l'on peut imaginer prendre :

$$M = (\det(V))^{1/p} V^{-1},$$

où V est la matrice de variance-covariance totale, afin de pondérer correctement les variables.

Cette méthode est souvent efficace quant à la précision de l'affectation obtenue : c'est une méthode locale qui ne dépend guère de la disposition géométrique des ensembles Ar et qui repose sur un principe empirique : "deux individus très proches ont de grandes chances d'appartenir au même Cr".

Malheureusement, elle est difficilement applicable telle quelle dans la pratique :

- La population de base peut être nombreuse (plus de 500) et le temps de calcul est alors très long. On peut trouver dans la littérature plusieurs

algorithmes de recherche des k plus proches voisins ([1],[2],[3],[4]) qui ont des performances comparables.

- Etant une méthode locale, l'affectation k.p.p.v ne tient pas compte de la forme globale des classes à discriminer. Elle peut être mauvaise lorsque c'est "la tendance générale" de la répartition qui importe.

- Il peut être difficile de trouver le meilleur k dans une méthode k.p.p.v.

II - PRINCIPE DE LA METHODE PROPOSEE

Notre but n'est pas seulement de proposer un algorithme rapide k.p.p.v, mais d'essayer de surmonter en partie l'ensemble des inconvénients énoncés plus haut.

Pour cela on effectue deux opérations :

- Un prétraitement de l'ensemble B afin de déceler comment sont géométriquement répartis les ensembles Ar. B sera ainsi partitionné en l+1 classes, l régions connexes et homogènes du point de vue des Ar et la zone hétérogène restante que l'on appellera zone trouble. Ce prétraitement a lieu une fois pour toutes.
- Une règle d'affectation mixte tantôt directe (géométrique), tantôt par voisinage, les plus proches voisins étant recherchés non pas sur tout l'ensemble mais sur une "fenêtre" dont le rayon est la distance au centre de gravité de la région la plus proche.

Le principe est donc de mener à bien le mieux possible la première étape (quitte à y passer beaucoup de temps), la 2ème étape étant ainsi instantanée.

III - PRETRAITEMENT

III - 1 QUELQUES DEFINTIONS

III-1.1. ENSEMBLES CONNEXES DANS E

Par analogie avec la topologie nous appellerons boule de E de rayon s et de centre x l'ensemble formé par x et ses s plus proches voisins, et ensemble connexe tout sous-ensemble C de E vérifiant la propriété suivante, notée P :

P) Pour tout (x,y) de C^2 il existe une suite de boules B0,...,Bl, incluses dans C, telles que pour tout i de 0 à l-1

$$Bi \cap Bi+1 \neq \emptyset \quad \text{avec } x \in B0 \quad \text{et} \quad y \in Bl$$

Intuitivement, cette notion est tout à fait analogue à la notion de connexité en topologie et nous nous appuirons sur cette analogie pour la construction d'un algorithme.

III-1.2. REGION DE E

On dira q'un sous-ensemble B de E est d'épaisseur au moins s0 si il existe une boule de rayon s0 incluse dans B. On dira qu'il est de taille au moins s1 si son cardinal est au moins égal à s1.

On appellera REGION (s0,s1) de E tout sous-ensemble connexe, d'épaisseur au moins s0 et de taille au moins S1. On a bien sur :

$$0 \leq s0 < s1$$

REMARQUE

Les régions (0,1) sont les connexes de E.

III-1.3. ELEMENTS CARACTERISTIQUES D'UNE REGION R

On définit tout d'abord les grandeurs habituelles :

- Centre de gravité : G , moyenne des éléments de la région.
- Métrique de Mahalanobis : $M = (\det(V)^{1/P})\ V^{-1}$ où V = matrice de variance-covariance $d_R(x,y) = t(x-y)\ M(x-y)$ est la distance de Mahalanobis associée à R.
- rayon maximal : $r\ max = \underset{x \in R}{Max} \{d_R(x,G)\}$

On peut également définir :

- rayon minimal : $r\ min = \underset{y \notin R}{Min} \{d_R(y,G)\}$
- Ellipse circonscrite : $\{x \in R^p / d_R(x,G) = r_{max}\}$
- Ellipse inscrite : $\{x \in R^p / d_R(x,G) = r_{min}\}$

On peut remarquer que toutes ces notions peuvent être définies indépendemment de la notion de région mais elles ne deviennent significatives que si l'ensemble considéré vérifie les propriétés d'une région ou tout au moins des propriétés voisines. Si par exemple on considère l'ensemble formé par 2 disques disjoints, l'ellipse inscrite est réduite du point G qui n'appartient d'ailleurs même pas à l'ensemble.

REMARQUE IMPORTANTE

La notion de région telle que nous l'avons définie est beaucoup moins forte que la convexité, ces régions pouvant avoir toutes les formes possibles pourvu qu'elles restent connexes. Ceci pour deux raisons :

- Algorithmiquement il est très difficile de reconnaître les zones convexes.
- La convexité est une hypothèse agréable mais exigeante et l'on risque d'obtenir des régions de cardinal bien trop faible.

III - 2. PARTITIONNEMENT EN REGIONS

III-2.1. DEFINTION

Soit A un sous-ensemble d'un ensemble fini E. On dira que R1,...,Rl,Z est un partitionnement en régions (s0,s1) si les ensembles R1,...,Rl, Z vérifient :

i) pour tout i < l, Ri est une région de taille au moins s1 et d'épaisseur au moins s0,

ii) pour tout couple (i,j) l'ensemble Ri U Rj n'est plus une région,

iii) le sous- ensemble Z est tel que :
- pour tout x de Z et pour tout i, l'ensemble Ri U {x} n'est plus une région,
- il n'existe pas de région (s0,s1) incluse dans Z.

III-2.2. THEOREME 1

Pour s0 et s1 donnés et pour tout sous-ensemble A de E, il existe un et un seul partitionnement en régions (s0,s1) de A.

DEMONSTRATION

. Cas s 0=0, s1=1 (cas connexe, il n'y pas de zone trouble).
Le théorème est l'équivalent du théorème de topologie d'existence et d'unicité de la décomposition en composantes connexes.

LEMME 1

Si C1, C2 sont deux ensembles connexes de E et s'il existe une boule B incluse dans C1 U C2 et telle que $B \cap C1 \neq \emptyset$ et $B \cap C2 \neq \emptyset$, alors C1 U C2 est connexe.

Démonstration

La démonstration est évidente : pour rejoindre un point x de C1 et un point y de C2 il suffit de transiter par la boule B. On joint x à x1 par une suite de boules où $x1 \in C1 \cap B$, on choisit un point x2 de $C2 \cap B$ et on joint x2 à y par une suite de boules : la réunion des deux suites obtenues permet de joindre x à y.

LEMME 2

Si C1,C2 est un partitionnement en deux ensembles connexes de C1 U C2 alors pour tout A1,A2 connexes tels que $A1 \subset C1$, $A2 \subset C2$, A1,A2 est un partitionnment de A1 U A2.

Démonstration

On suppose que A1 U A2 est connexe. Alors il existe nécessairement une boule de A1 U A2 contenant à la fois des éléments de A1 et de A2. Il suffit d'appliquer le Lemme 1.

Existence

On le démontre par récurrence sur le nombre d'éléments de A. C'est évident pour le singleton (n=1). Supposons donc la propriété vraie pour les ensembles à n éléments et soit A un ensemble à n+1 éléments. Soit x de A, il existe un partitionnement de A-{x} noté C1,...,Ck. Si pour tout j,Cj U{x} n'est pas connexe alors C1,...,Ck,{x} est un partitionnement de A. Sinon, soit par exemple C1,...,Cl tels {x} U C1 U...U Cl soit connexe et $\forall$ j l+1 $\leq$ j $\leq$ k, {x}U C1 U..UCl UCj n'est plus connexe alors {x} U C1 U...U Cl, Cl+1,...Ck est un partitionnement de A.

Unicité

Supposons tout d'abord que A est connexe. Il faut alors montrer que le seul partitionnment de A est A lui-même.

Considérons donc A1,A2,...,An un partitionnement de A. Soit x de Ai et y de Aj, i ≠ j. Alors, comme A est connexe, il existe une suite de boules de A "reliant" x à y. Soit B la première boule qui n'est pas incluse dans Ai et xi0 son centre. On suppose que xi0 ∈ Ai0. Soit alors B0(xi0,r0), la boule de centre xi0 et de rayon r0 où :

$$r0 = \min\{r/ \text{ il existe } z \in A-Ai0 \text{ et } z \in B\}.$$

Cette boule existe nécessairement puisque $B \not\subset Ai0$, que i=i0 ou pas. Supposons que $z \in Aj0$ où $j0 \neq i0$. Il suffit d'appliquer le Lemme 1 à Ai0 et Aj0. Donc Ai0 U Aj0 est connexe ce qui contredit la propriété ii).

Soit maintenant A quelconque et C1,...,Cn et D1,...,Dm deux partitionnements de A. Soit Fi = C1 ∩ Di,i=1,m. On fait un partitionnment de chaque Fi. D'après le Lemme 2 on obtient ainsi un partitionnment de C1, ce qui n'est possible, d'après ce qui précède, que si tous les ensembles sauf un sont vides Il vaut C1. On a donc montré qu'il existe j tel que C1 = Dj. On raisonne de même avec C2,...,Cn.

. Cas s0,s1 quelconques

Existence

C'est évident : on fait un partitionnement en ensembles connexes puis on obtient Z par la réunion de tous les ensembles connexes n'étant pas (s0,s1) On vérifie que Z possède les propriétés souhaitées par unicité du partitionnement en ensembles connexes.

Unicité

Soit R1,...,Rn,Z et S1,...,Sm,T deux partitionnements en région (s0,s1) de A. Alors, si l'on partitionne Z et T en ensembles connexes, on sait, d'après ce qui précède, que les partitionnements R1,...,Rn, Z1,...,Zk et S1,...,Sm, T1,...,Tl sont identiques, mais on ne peut avoir Zi = Sj car Zi n'est pas une région (s0,s1) et, de même, on ne peut avoir Ti = Rj. On a donc finalement Z = Z1 U ... U Zk = T1 U ... U Tl = t et les Ri, Tj égaux deux à deux.

C.Q.F.D.

III-2.3. CONCLUSION

L'intérêt d'un tel partitionnement est d'obtenir le découpage de Ar en régions bien définies géométriquement et la possibilité d'utiliser l'ensemble de notions définies précédemment dans un algorithme d'affectation.

Le but de l'algorithme de prétraitement est donc non seulement de trouver le bon partitionnement, mais également de calculer pour chaque région obtenue ses grandeurs caractéristiques.

III - 3 ALGORITHME DE PRETRAITEMENT

III-3.1. PRINCIPE DE L'ALGORITHME

On se donne (s0,s1) et une classe Ar que l'on veut partitionner en régions (s0,s1) :

- on initialise Z à Ar,
- on parcourt l'ensemble Ar dans l'ordre du fichier, soit un point x de Ar
- on calcule la plus grande boule de centre x,Bx, incluse dans Ar. Plusieurs cas peuvent alors se présenter :
  - . ray(Bx) < s0 et il n'existe pas de région R déjà formée telle que $Bx \cap R \neq \emptyset$; on passe à l'élément de Ar suivant, x restant dans Z.
  - . ray(Bx) ≥ s0 et il n'existe pas de région R déjà formée telle que $Bx \cap R \neq \emptyset$; une région R = Bx, (s0,card(Bx)), est formée.
  - . il existe des régions R1,...,Rm déjà formées telles que $Bx \cap Rj \neq \emptyset$; une région R = Bx U R1 U ... U Rm est alors formée,
- on parcourt Ar jusqu'à ce que le partitionnement se stabilise,
- on remet dans Z toutes les régions de cardinal inférieur à s1.

III-3.2. THEOREME 2

Le partitionnement de Ar obtenu est l'unique partitionnement en régions (s0,s1) de Ar.

Démonstration

On vérifie que les sous-ensembles sont bien des régions (s0,s1). Ceci est pratiquement évident et repose sur deux propositions élémentaires :

toute boule est connexe et l'union de connexes dont l'intersection n'est pas vide est connexe.
Les autres points de la définition se vérifient eux aussi aisément.

III-3.3. PRETRAITEMENT : UTILISATION CONCRETE DE L'ALGORITHME

(Dans toute la suite p.p.v. signifie "plus proche(s) voisin(s)")

On effectue le partitionnement pour tous les Ar après avoir choisi les seuils s0 et s1 (ces seuils dépendent de la taille du fichier de base, du nombre de variables, et plus intuitivement du nombre de p.p.v. que l'on considèrera dans l'algorithme d'affectation. Nous y reviendrons plus tard).

On calcule ensuite les grandeurs caractéristiques définies en III-1.3.

On obtient ainsi :

- ntr régions (s0,s1) de E (R1,R2,...,Rntr) avec leur marquage W : W(i) = r où Ar est le sur-ensemble de Ri (Ri est une région où les éléments ont pour modalité r),
- on associe à chaque région son centre de gravité Gi, sa métrique Mi (ou di), ses rayons : maximal RMAXi et minimal RMINi

Quelques remarques :

- La métrique choisie sera soit la métrique usuelle, soit la métrique associée à l'inverse de la matrice de variance co-variance totale (ce dernier choix étant nécessaire si l'on n'est pas sûr de disposer de variables indépendantes et de même importance prédictive).
- l'algorithme peut être long mais pratiquement 2 ou 3 itérations suffisent pour un ensemble Ar.
- Il se peut que pour un Ar on ne trouve aucune région : on peut alors choisir s0 plus petit pour amorcer l'algorithme.
- Il est bien entendu intéressant d'avoir des régions de grande épaisseur et de cardinal élevé : l'algorithme d'affectation n'en sera que plus performant.

IV - ALGORITHME D'AFFECTATION

IV-1. PRINCIPE GENERAL

Comme cela a été précisé au début nous voulons, d'une part un algorithme rapide, et d'autre part une affectation tenant compte de la forme des classes Ar c'est-à-dire de leur découpage en régions et de la forme de ces régions. La méthode proposée est une méthode du type p.p.v. mais précédée de trois tests d'appartenance directe à une région. De plus, les plus proches voisins ne sont calculés que sur un sous-ensemble de B et on calcule les k plus proches voisins de k = kmin à kmax, un critère étant ensuite choisi qui fournit le meilleur k. L'affectation n'a lieu que si le critère maximum obtenu est supérieur à un certain seuil de tolérance ; dans le cas contraire on préfèrera affecter à la région la plus proche.

IV-2. DESCRIPTION DE L'ALGORITHME

Soit deux entiers kmin, kmax avec kmin < kmax et un nombre tol ($0 \leq tol < 1$).

Soit Xnew un point de E que l'on désire affecter à une modalité r donc à un ensemble Cr.

On note : - di (Xnew,Gi), la distance de Mahalanobis entre Xnew et Gi ,
- D (Xnew,x), la distance usuelle.

(1) On calcule les distances di (Xnew,Gi) et on appelle

$RO = \min_i \{di\ (Xnew,Gi)\}$ et io l'indice de la région pour laquelle ce min est atteint.

(2) Test 1 :

Si il existe iS tel que d_{i_S} (Xnew, Gis) < RMINis alors on affecte directement Xnew à W(is).

(3) On considère {i1,...,it} l'ensemble des i tels que

di (Xnew,Gi) < RO + RMAXi,

et $ZO = \{x \in Z \ / \ D(Xnew,x) < RO\}$

(4) Test 2

Si t = 0 et card {ZO} < kmin : on affecte Xnew à W(iO)

(5) Si t > 0 on considère la fenêtre

$$F = ZO \cup \{x \in R_{i_1} / d_{i_1}(Xnew,x) < RO\} \cup \ldots$$

$$\ldots \cup \{x \in R_{i_t} / d_{i_t}(Xnew,x) < RO\}$$

l'ensemble des points de B à une distance de Xnew inférieure à RO.

- Test 3 : Si card (F) < kmin on affecte Xnew à W(iO)

- Sinon, on appelle une procédure de recherche de plus proches voisins à l'intérieur de F : KPPV(kmin,kmax,tol) qui détermine l'affectation de Xnew. (Voir détails de la procédure en IV-3.).

Commentaires

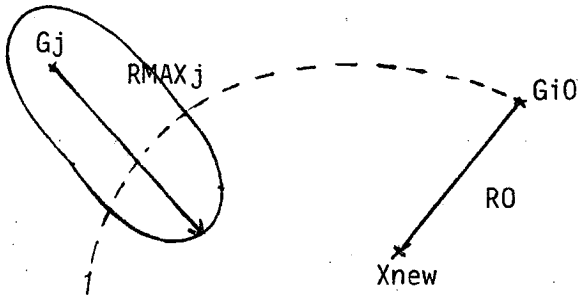
L'étape 1 consiste simplement à calculer la région la plus proche et fournit également le rayon de la fenêtre sur laquelle on calculera les P.P.V.

L'étape 2 est le test qui détermine si oui ou non le point Xnew tombe à l'intérieur de l'ellipse inscrite.

A l'étape 3 on calcule l'ensemble des régions concernées, c'est-à-dire pouvant avoir une intersection non vide avec la fenêtre $\{x/d(Xnew,x) < RO\}$ (On voit facilement que ces régions sont telles que di(Xnew,Gi) < RO+RMAXi, voir dessin).

L'étape 4 teste le nombre de régions concernées. Si celui ci est égal à 1 et si, de plus, le nombre d'éléments de la zone trouble tombant dans F est suffisamment faible, on affectera Xnew à la classe associée à la seule région concernée.

A l'étape 5 on appelle la procédure K.P.P.V., sauf si le nombre d'éléments de la fenêtre est trop faible, auquel cas on affectera Xnew à la classe associée à la région la plus proche.



IV-3 LA PROCEDURE K.P.P.V.

IV-3.1. RAPPEL

Le principe de l'affectation du type plus proche voisin repose sur la notion intuitive suivante : si K est une entier ($K > 0$) et V est la boule de centre Xnew et de rayon K alors, on peut estimer la densité de probabilités de l'appartenance de Xnew à Ar par :

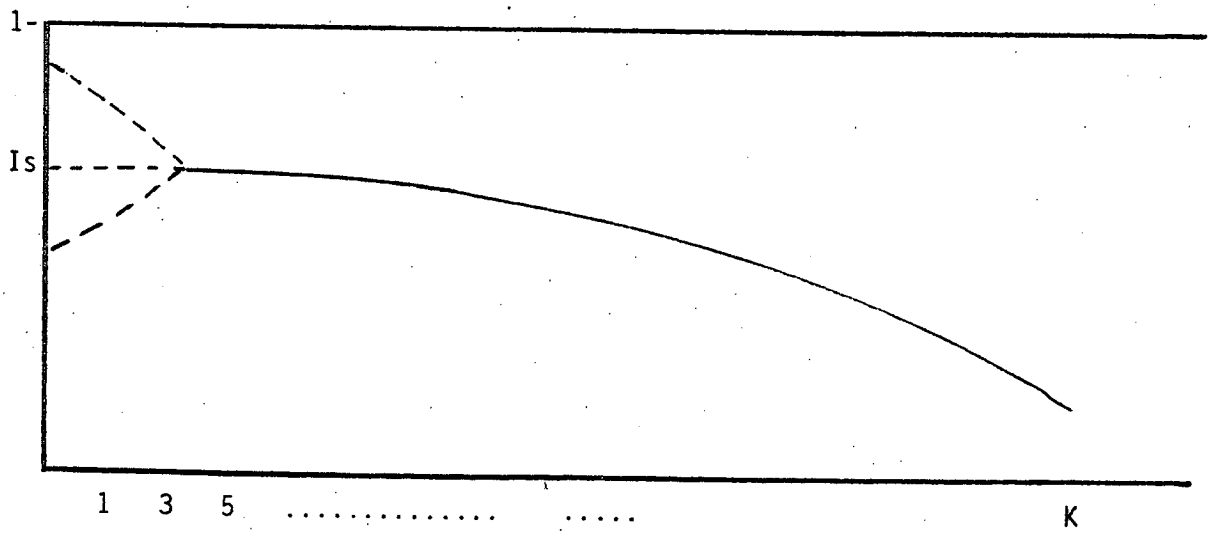
$$P(Xnew \in Ar) = card\ (V \cap Ar) / K$$

qui représente la proportion d'éléments de Ar à l'intérieur du Volume V.

Dans une affectation K.P.P.V. on affectera donc Xnew à la modalité maximisant card $(V \cap Ar)$

IV-3.2. CHOIX DE K

Le choix de K est le problème le plus délicat pour l'utilisation d'un algorithme des K.P.P.V., puisqu'il dépend d'une multitude de facteurs dont l'influence est difficile à apprécier : taille du fichier, nombre de prédicteurs, nombre de classes, caractéristiques statistiques du fichier, etc... La solution empirique qui semble la plus satisfaisante est de calculer le coefficient Is(K) mesurant, pour chaque K, le pourcentage de réussite sur le fichier d'apprentissage lorsqu'on effectue une affectation K.P.P.V., et de tracer la courbe (K,is(K)) : cette courbe aura en général la forme suivante :



(pour un exemple précis, voir la partie 5)

Remarques

On ne considère que les valeurs impaires de K, les cas d'égalité des votes étant moins fréquents. (i.e. on a en général $Is(2K) < Is(2K-1)$ et $Is(2K) < Is(2K+1)$.

La forme de la courbe pour les petites valeurs de K est très variable, le maximum pouvant même être atteint pour K = 1.

Il est possible après examen de la courbe, de choisir une bonne valeur de K.

IV-3.3. LA PROCEDURE KPPV (kmin,kmax,tol)

Dans ce paragraphe nous proposons donc une nouvelle procédure dont le principe est de calculer les K plus proches voisins de K = kmin jusqu'à kmax, ces valeurs pouvant être choisies à partir de la courbe précédente. On exige seulement :

$$1 \leqslant kmin < kmax$$

(kmax peut être, par exemple, la valeur à partir de laquelle la courbe décroît plus rapidement, kmin peut être pris égal à 3).

La métrique utilisée peut être la distance usuelle. Mais la plupart du temps on préfèrera prendre pour d(Xnew,x) la distance de Mahalanobis associée à la région à laquelle appartient x ou bien la distance usuelle si x appartient à la zone trouble. On tient compte ainsi de la forme des régions.

A chaque étape (pour chaque K) on calcule :

- V(K) l'ensemble des K.P.P.V. de Xnew
- $Maj(K) = \max \{card(V(K) \cap Ar)\}$
- im(K), la modalité ayant obtenu la majorité Maj(K)
- P(K) = Maj(K)/K, estimation de la probabilité de Xnew d'appartenir à Cim (i.e. d'avoir la modalité im).

On décidera d'affecter Xnew à im(KO) si :

$$P(KO) = \max [P(K)] \quad \text{pour } k = kmin,\ldots,kmax$$

et

$$P(KO) > tol$$

Si pour tout K, $P(K) < tol$, on affectera Xnew à la modalité associée à la région la plus proche.

THEOREME 3

Soit KO le premier K tel qu'on ait $P(K) > \max(tol, kmax/(K+kmax))$. Alors l'affectation de Xnew sera im(KO).

Remarques

- il se peut qu'il n'y ait pas de K satisfaisant cette relation
- pour K0 = Kmax, tol < 0.5, la relation revient à dire que im(K0) a la majorité absolue
- ce résultat inclut bien entendu le cas Maj(K0) = K0 i.e. P(K0) = 1

Preuve

On peut prouver que, si il existe un K1 > K0 tel que P(K1) > P(K0), alors im(K1) = im(K0)

Supposons donc qu'il y ait un K > K0, avec im(K) ≠ im(K0), tel que P(K) > P(K0). Soit Maj(K) / K > Maj(K0) / K0. Le cas le plus favorable pour que l'on ait cette relation est que :

- de K0+1 jusqu'à K, la boule V ne soit remplie qu'avec des éléments de la classe im(K)
- K = kmax (le critère n'en sera que meilleur)
- à l'étape K0, tous les éléments qui n'appartenaient pas à im(K0) appartenaient à im(K)

P(kmax) peut alors s'exprimer par

$$(K0-Maj(K0)+kmax-K0) / kmax = (kmax-Maj(K0)) / kmax$$

mais $P(K0) > kmax/(kmax+K0) \Longrightarrow Maj(K0) > (K0 \times kmax)/(Kmax+K0)$

et donc $P(kmax) < (kmax-(K0 \times kmax)/(kmax+K0))/kmax=1-K0/(kmax+K0)$

et donc $P(kmax) < kmax/(kmax+K0) < P(K0)$

C.Q.F.D.

Conséquences

Ce théorème permet un gain de temps conséquent puisque, le plus souvent, on arrêtera les calculs avant K=kmax.

Si l'on écrit la relation sous la forme :

$$Maj(K0)/(K0-Maj(K0)) > kmax/K0$$

ceci peut permettre de choisir kmax en fonction de ce que l'on souhaite avoir comme type d'affectation pour les petites valeurs de K.

Exemple

Supposons que l'on estime que, pour K=4, une majorité à 3 contre 1 ne doive pas toujours être suffisante. Il faudra prendre, pour que cette majorité ait une chance d'être battue, kmax > 4x3/1 = 12.

Par contre si l'on estime que pour K=5, une majorité à 4 contre 1 est assez forte pour que l'on ne souhaite pas aller plus loin, on prendra kmax < 5x4 = 20.

THEOREME 4

Si à l'étape K on a la relation (Maj+kmax-K)/kmax < tol alors l'affectation de Xnew sera la région la plus proche.

Preuve

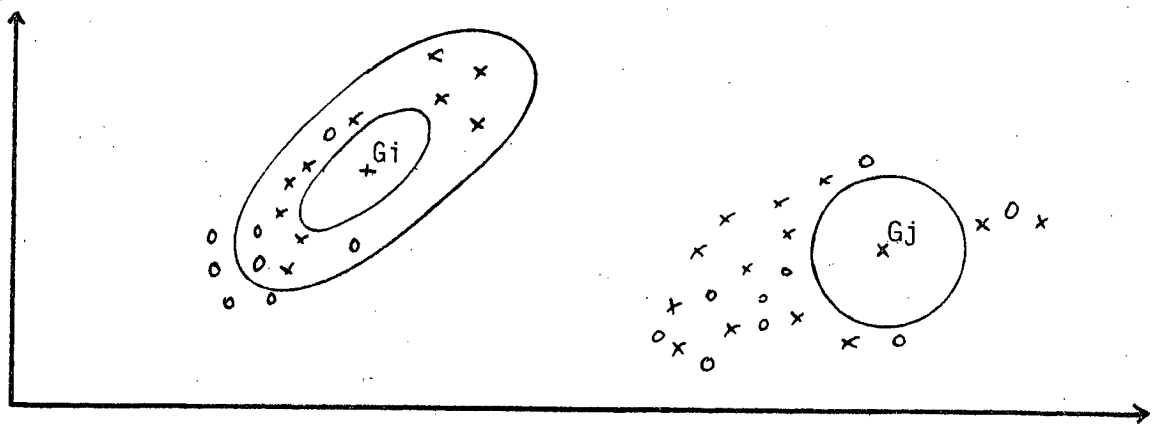
C'est évident : le cas le plus favorable pour rendre le critère meilleur que tol est, qu'à partir de K, V ne soit rempli qu'avec des éléments de im(K). Le critère vaudra alors, pour K = kmax, (Maj+kmax-K)/kmax qui est inférieur à tol par hypothèse.

IV-4. QUELQUES REMARQUES SUR LE TRAITEMENT INFORMATIQUE

Informatiquement les étapes 1 et 2 de l'algorithme sont confondues, le test s'effectuant au fur et à mesure du calcul des di(Xnew,Gi).

Il est possible de modifier légèrement l'algorithme à plusieurs niveaux :

- L'étape 3 peut être simplifiée en ne retenant que les régions telles que Xnew soit contenu dans leur ellipse circonscrite (di(Xnew,GI) < RMAXi). Dans ce cas, le min de l'étape 1 ne sera calculé que sur ces régions.
- On peut également dans un but de simplification (gain de temps et surtout de place) ne pas conserver en mémoire les points d'une région qui appartiennent à son ellipse inscrite. Le fichier d'apprentissage se présente alors comme suit :



Dans ce cas on considère simplement que les éléments intérieurs à une région n'interviennent pas lorsque l'affectation n'est pas directe (on prendra alors sans aucun doute un kmax plus faible dans la procédure KPPV).

- Programmation de la procédure KPPV(kmin,kmax,tol) :

informatiquement la procédure KPPV n'est pas équivalente au calcul des K plus proches voisins kmax-kmin+ 1 fois, bien heureusement! Elle consiste à chaque étape à mettre à jour un tableau appelé VOTE dont la dimension est égale au nombre total de modalités et tel que

$$VOTE(i) = \text{card}\,(V(K) \cap Ai)$$

(0) Le critère P(KO) est initialisé à la valeur tol.

(1) Calcul des kmin plus proches voisins, initialisation de VOTE, calcul de P(k), test.

(2) Pour les autres K on teste le nouvel arrivant (sa modalité est-elle im(K-1) ou non ?) La mise à jour de VOTE, Maj(K),P(K),im(K) en est grandement facilitée.

(3) Les tests ont, bien entendu, lieu au fur et à mesure, les valeurs optimales écrasant les précédentes ; on effectue en premier les tests de sortie définitive ($P(K) > \max(tol, kmax/kmax+K)$) et $Maj+kmax-K/kmax < tol$).

En résumé, lors de la programmation de l'algorithme nous avons essayé de gagner de la place et du temps à tous les niveaux pour rendre la méthode utilisable dans tous les cas de figure, y compris dans le cas d'un très grand volume de données.

IV-5. AVANTAGES DE LA PROCEDURE

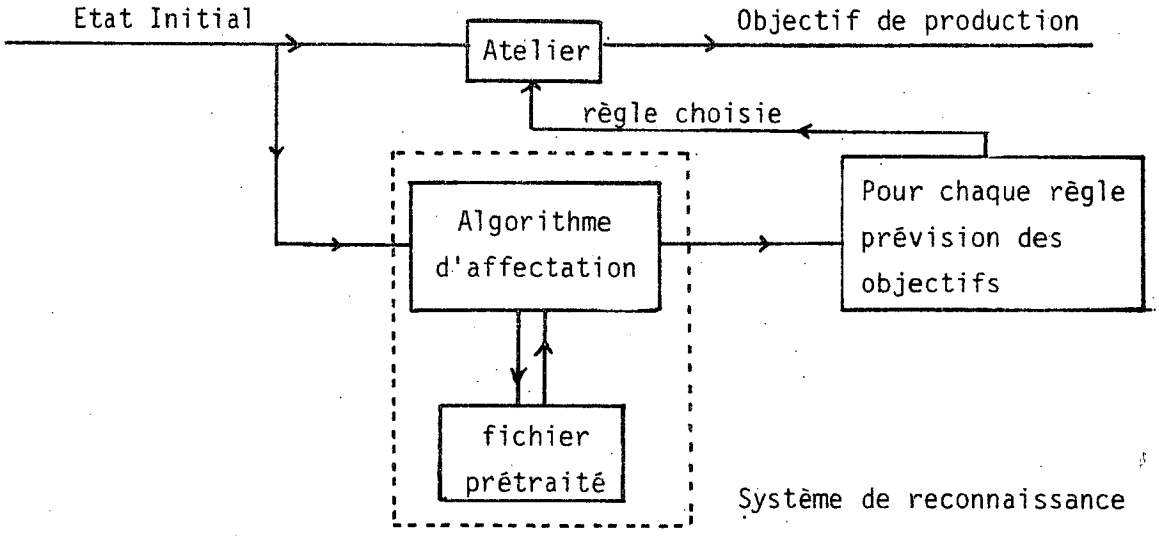
Le gain de temps obtenu grâce au prétraitement permet d'effectuer le calcul des K plus proches voisins pour plusieur valeurs de K. Ceci permet de résoudre 2 problèmes importants :

- Le choix du meilleur K.
- On ne rejette l'affectation P.P.V. qui si l'on est dans un cas d'indétermination pour toute valeur de K. Par exemple, supposons que pour k = 7 la boule contienne 4 éléments de la classe 1 et 3 éléments de la classe 2. En ne regardant que cette valeur de K on rejetterait sans doute l'affectation alors qu'il se peut que pour k = 4 tous les éléments appartiennent à la classe 1.

La méthode proposée n'est donc pas seulement un algorithme rapide P.P.V. mais bien une "méthode compromis" entre une méthode géométrique et une méthode de voisinage (utilisation des métriques de Mahalanobis associées aux régions, affectation géométrique lorsque l'affectation P.P.V. n'est pas suffisamment sûre).

V - APPLICATIONS

Nous avons intégré notre méthode dans un système de reconnaissance pour l'ordonnancement d'ateliers en temps réel qui constitue notre centre d'intérêt principal. Le système se présente comme suit :



Il s'agit donc de prévoir l'objectif qualificatif (respect des délais, diminution des en-cours,...) que l'on obtiendra après application d'une certaine règle de gestion (FIFO, priorité au produit le plus en retard,...).

On dispose ainsi d'un fichier d'apprentissage issu de simulations précisant pour un état initial défini par p variables (commande, niveau d'en-cours,...) la classe d'objectifs obtenue (par exemple, délais non respectés, diminution des en -cours) après application d'une règle donnée. Lorsqu'un nouvel état se présente, on veut pouvoir dire quelle classe d'objectifs va être atteinte après application de cette même règle.

V-1. LES DONNEES

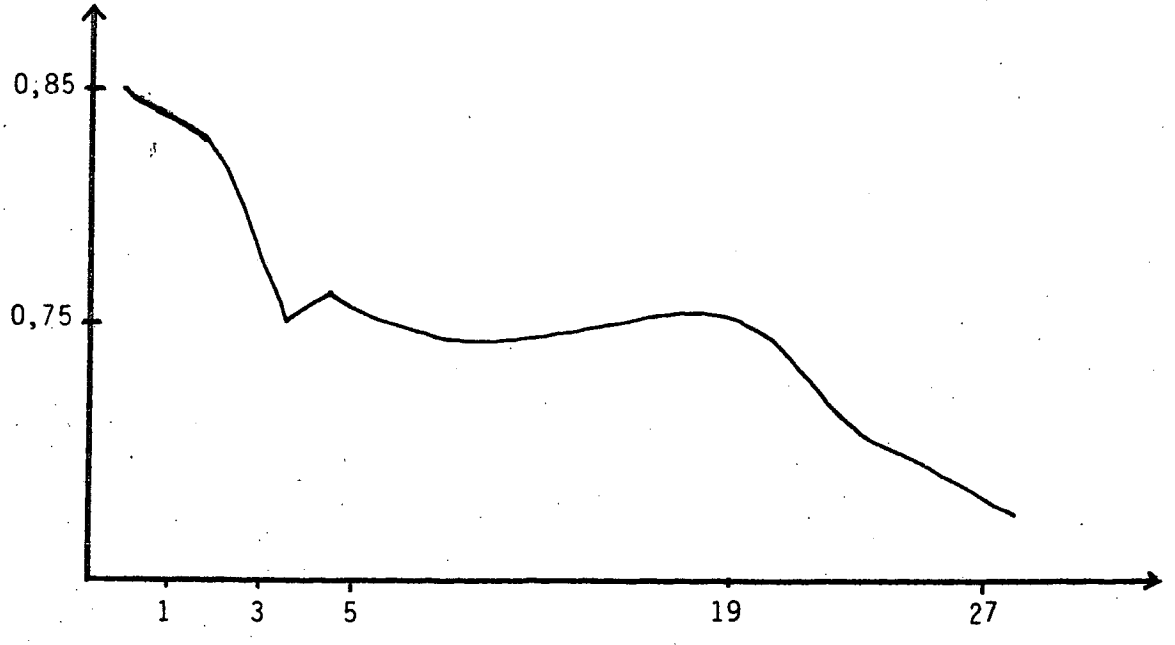
On dispose d'un fichier de 460 éléments définis par deux variables d'état (les quotas de 2 des 3 produits qui vont entrer dans l'atelier) et la classification obtenue après application de la règle F.I.F.O.. Le nombre total de modalités est 8. On décide de conserver 85 % des éléments pour le fichier d'apprentissage et 15 % pour le fichier tests tirés aléatoirement.

V-2. PRETRAITEMENT

On effectue le prétraitement en région (s0,s1) du fichier d'apprentissage avec les valeurs s0 = 3, s1 = 8 (pour des valeurs de s1 inférieures, les matrices de variance-covariance risqueraient d'être singulières). On obtient ainsi 12 régions réparties de la façon suivante (cf. schéma) :

- 2 régions associées à chaque modalité 1,3,6,7
- 1 région associée à chaque modalité 2,4,8

Courbe Is(K)



V-3. AFFECTATION

On a ensuite affecté les éléments du fichier test et comparé ces affectations aux appartenances réelles. Les résultats sont les suivants : plusieurs combinaisons de valeurs kmin,kmax,tol ont été essayées. Les résultats dépendent peu de kmin,kmax (i.e. on obtient sensiblement les mêmes résultats pour (2,7),(2,9),(3,11) etc...).
Par contre le seuil de rejet tol semble être optimal entre 2/3 et 3/4 (le pourcentage de réussite chutant très nettement à partir de 3/4).

AFFECTATION DE 69 NOUVEAUX ELEMENTS PAR LA METHODE MIXTE

---

kmin=2 kmax=9 tol=0.7 metrique=MAHALANOBIS

Affectation directe:35
Nombre de bien affectes:35

Affectation geometrique apres rejet:2
Nombre de bien affectes:2

Affectation P.P.V:32
Nombre de bien affectes:25

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:89.855072%

---

kmin=2 kmax=9 tol=0. metrique=USUELLE

Affectation directe:35
Nombre de bien affectes:35

Affectation geometrique apres rejet:0
Nombre de bien affectes:0

Affectation P.P.V:34
Nombre de bien affectes:25

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:86.956522%

---

kmin=2 kmax=9 tol=0.8 metrique=MAHALANOBIS

Affectation directe:35
Nombre de bien affectes:35

Affectation geometrique apres rejet:8
Nombre de bien affectes:3

Affectation P.P.V:26
Nombre de bien affectes:21

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:85.507246%

On a donne ici les meilleurs resultats obtenus (2,9,0.7,Mah),la 2eme serie de resultats soulignant l'importance du seuil de rejet et de la distance de mahalanobis.

Remarque

Les 69 affectations sont obtenues quasi-instantannement.

5.4 Comparaison avec d'autres methodes

On donne rapidement les resultats obtenus apres applications de methodes classiques:

AFFECTATION DE 69 NOUVEAUX ELEMENTS PAR LA METHODE GEOMETRIQUE

Nombre d'elements testes:69
Nombre de bien affectes:51

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:73.913043%

AFFECTATION DE 69 NOUVEAUX ELEMENTS PAR LA METHODE CLASSIQUE P.P.V

---

k=3

Nombre d'elements testes:69
Nombre de bien affectes:57

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:82.608696%

---

k=5

Nombre d'elements testes:69

```
Nombre de bien affectes:56

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:81.15942%
--------------------------------------------------------------------------------

k=9

Nombre d'elements testes:69
Nombre de bien affectes:57

POURCENTAGE TOTAL DE REUSSITE:82.608696%
--------------------------------------------------------------------------------
```

CONCLUSION

Nous pensons que ce que nous venons de décrire permet de traiter de nombreux cas en analyse discriminante prédictive, en particulier lorsqu'une méthode du type plus proches voisins s'avère efficace. Elle permet un gain de temps et de précision.

Deux inconvénients demeurent néanmoins :

- La nécessité d'effectuer un prétraitement parfois très long (surtout si le nombre de variables prédictives est important).
- La place mémoire occupée par la nouvelle structure des données (fichier des régions et de leurs caractéristiques).

Ainsi, on peut n'utiliser, si on le souhaite, qu'une des étapes de la méthode :

- Le prétraitement uniquement afin de déterminer les régions et leur centre de gravité. On appliquera ensuite une méthode géométrique classique, en raisonnant sur les régions et non pas sur les classes.
- L'algorithme d'affectation sans prétraitement en raisonnant sur les classes et non pas sur le partitionnement des régions.

BIBLIOGRAPHIE

[1] : K. FUKUNAGA and P. NARENDRA, "A branch and bound algorithm for computing k-nearest neighbours", IEEE, May 1973.

[2] : J.H. FRIEDMAN, "An algorithm for finding nearest neighbours", IEEE, October 1975.

[3] : D. SALAS ALVES, "Structures récursives : application à la recherche des plus proches voisins et à la classification", (Thèse).

[4] : T. YUNCK, "A technique to identify nearest neighbours", IEEE, Oct 1976.

[5] : Pierre A. DEVIJVER, "Reconnaissance des formes par la méthode des plus proches voisins".

[6] : J.M. ROMEDER, "Méthodes et programmes d'analyse discriminante", Dunod 1973.

[7] : F. BONNEAU, J.M. PROTH, "Applications de règles de gestion à un système de fabrication : classification des objectifs atteints en vue de leur utilisation", Rapport de Recherche INRIA n° 372, mars 1985.

[8] : E. DIDAY, "Eléments d'analyse des données".

Imprimé en France

par

l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique