Feuille 7 : correction

Exercice 1 (Réduction de dimension : Analyse en Composantes Principales)

1. Pour $\alpha_1, \dots, \alpha_p \in \mathbb{R}^p$ orthogonaux avec $\|\alpha_j\| = 1$, on a $\pi_V(X_i) = \sum_{j=1}^d \langle X_i, \alpha_j\rangle \alpha_j$. Ainsi

$$\sum_{i=1}^n \|X_i - \pi_V(X_i)\|^2 = \sum_{i=1}^n \left(\|X_i\|^2 - 2\sum_{j=1}^d \langle X_i, \alpha_j\rangle^2 + \sum_{j=1}^d \langle X_i, \alpha_j\rangle^2 \right)$$
$$= \sum_{i=1}^n \|X_i\|^2 - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^d \langle X_i, \alpha_j\rangle^2 \,.$$

Ainsi, minimiser $\sum_{i=1}^n \|X_i - \pi_V(X_i)\|^2$ revient à maximiser

$$\sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^n \langle X_i, \alpha_j\rangle^2 = \sum_{j=1}^d \|\mathbf{X}\alpha_j\|^2 \,.$$

2. La matrice $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ étant symétrique réelle, elle est diagonalisable dans une base orthonormée $(v_1, \dots, v_p)$ de vecteurs propres associés aux valeurs propres $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_p$ (rangées par ordre décroissant). En remarquant que

$$\sum_{j=1}^d \|\mathbf{X}\alpha_j\|^2 = \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^p \lambda_k \langle v_k, \alpha_j\rangle^2 \,,$$

on peut en déduire qu'une solution est donnée par $(\alpha_1, \dots, \alpha_d) = (v_1, \dots, v_d)$.

3. Il suffit de montrer que $\langle \mathbf{X}v_k, \mathbf{X}v_\ell\rangle = 0$ pour $1 \leq k \neq \ell \leq p$. On a

$$\langle \mathbf{X}v_k, \mathbf{X}v_\ell\rangle = v_k^T\mathbf{X}^T\mathbf{X}v_\ell = \lambda_\ell \langle v_k, v_\ell\rangle = 0\,.$$

4. On a

$$\sum_{i=1}^n \|\pi_V(X_i)\|^2 = \sum_{j=1}^d \lambda_j \qquad \text{et} \qquad \sum_{i=1}^n \|X_i\|^2 = \sum_{j=1}^p \lambda_j \,.$$

Exercice 2 (ACP & RKHS)

1. Soit $V = \mathrm{Vect}\,(K_{x_1}, \dots, K_{x_n})$ et $f \in \mathcal{H}$ avec $\|f\|_{\mathcal{H}} = 1$. On peut écrire $f = f_V + f_{V^\perp}$ avec $f_V \in V$ et $f_{V^\perp} \in V^\perp$. Si $f_V = 0$, alors

$$\sum_{i=1}^n \langle K_{x_i}, f\rangle_{\mathcal{H}}^2 = 0\,.$$

Si $f_V \neq 0$ et $f_{V^\perp} \neq 0$, alors $0 < \|f_V\|_{\mathcal{H}}^2 < 1$ et

$$\sum_{i=1}^n \langle K_{x_i}, f\rangle_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{i=1}^n \langle K_{x_i}, f_V\rangle_{\mathcal{H}}^2 < \sum_{i=1}^n \langle K_{x_i}, \frac{f_V}{\|f_V\|_{\mathcal{H}}}\rangle_{\mathcal{H}}^2 \,.$$

Ainsi $f_1 \in V$. Maintenant pour $f = \sum_{j=1}^n \alpha(j) K_{x_j} \in V$, on a

$$\|f\|_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{i,j=1}^n \alpha(i)\alpha(j)\mathbf{K}_{i,j} = \alpha^T\mathbf{K}\alpha\,,$$

et

$$\sum_{i=1}^{n}\langle K_{x_i}, f\rangle_{\mathcal{H}}^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n}\alpha(j)\mathbf{K}_{i,j}\right)^2 = \alpha^T\mathbf{K}^2\alpha\,,$$

et l'on obtient bien la caractérisation voulue.

2. Soit $(v_1, \ldots, v_n)$ une base orthonormée de vecteurs propres associés aux valeurs propres $\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n \geq 0$ de $\mathbf{K}$. Pour tout $\alpha \in \mathbb{R}^n$ avec $\alpha^T\mathbf{K}\alpha = 1$, on a

$$\alpha^T\mathbf{K}^2\alpha = \alpha^T\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i v_i v_i^T\right)\alpha = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i^2\langle\alpha, v_i\rangle^2 \leq \lambda_1\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\langle\alpha, v_i\rangle^2 \leq \lambda_1\,,$$

puisque $\alpha^T\mathbf{K}\alpha = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i\langle\alpha, v_i\rangle^2 = 1$. D'autre part,

$$\left(\lambda_1^{-1/2}v_1\right)^T\mathbf{K}^2\left(\lambda_1^{-1/2}v_1\right) = \lambda_1^{-1}\left(\lambda_1^2 v_1^T v_1\right) = \lambda_1\,.$$

3. Remarquons déjà que $(f_1, \ldots, f_d)$ forme une famille orthonormée pour le produit scalaire $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}}$. En effet

$$\langle f_k, f_\ell\rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{i,j=1}^{n}\mathbf{K}_{i,j}\alpha_k(i)\alpha_\ell(j) = \alpha_k^T\mathbf{K}\alpha_\ell = \lambda_k^{-1/2}\lambda_\ell^{1/2}v_k^T v_\ell = \begin{cases}1 & \text{si } k = \ell\,,\\ 0 & \text{si } k \neq \ell\,.\end{cases}$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}\pi_V(K_{x_i}) &= \sum_{j=1}^{d}\langle K_{x_i}, f_j\rangle_{\mathcal{H}} f_j\\ &= \sum_{j=1}^{d}\langle K_{x_i}, \sum_{\ell=1}^{n}\alpha_j(\ell)K_{x_\ell}\rangle_{\mathcal{H}} f_j\\ &= \sum_{j=1}^{d}[\mathbf{K}\alpha_j](i) f_j\\ &= \sum_{j=1}^{d}\lambda_j^{1/2}v_j(i) f_j\\ &= \sum_{j=1}^{d}\lambda_j\alpha_j(i) f_j\,.\end{aligned}$$