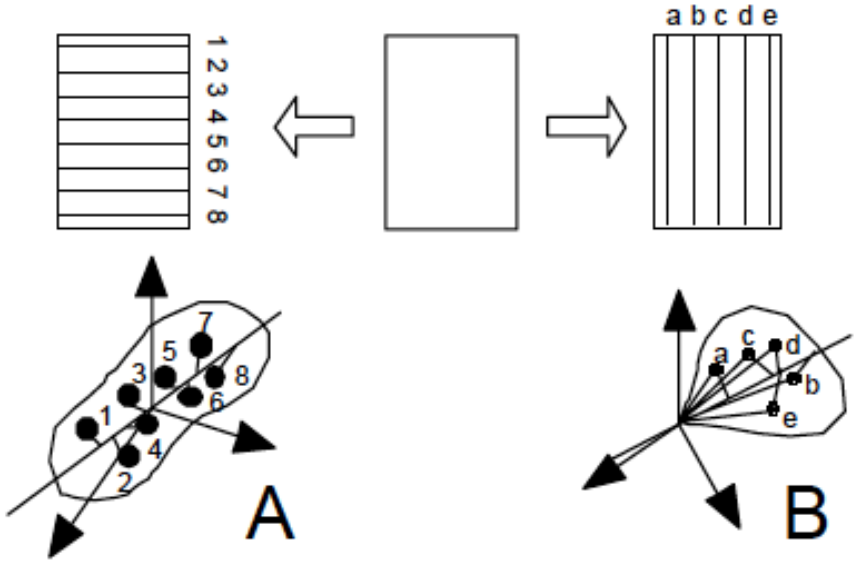
Analyse en Composantes Principales

Anne B Dufour

Octobre 2013

Introduction

Soit $\mathbf{X}$ un tableau contenant p variables mesurées sur n individus.



- Situation A : n points-lignes dans $\mathbb{R}^p$
- Situation B : p points-colonnes dans $\mathbb{R}^n$

Objectif :

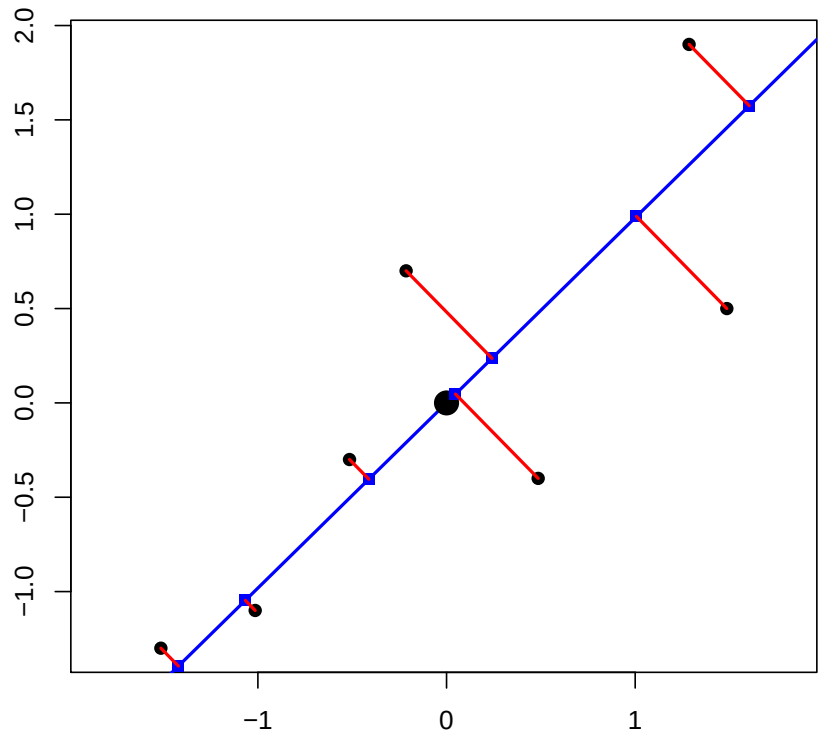
Projection d'un nuage de points sur des axes qui maximisent l'inertie projetée

Situation A

Représentation des individus dans l'espace des variables

Enoncé (1)

Deux variables $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ sont mesurées sur n individus.



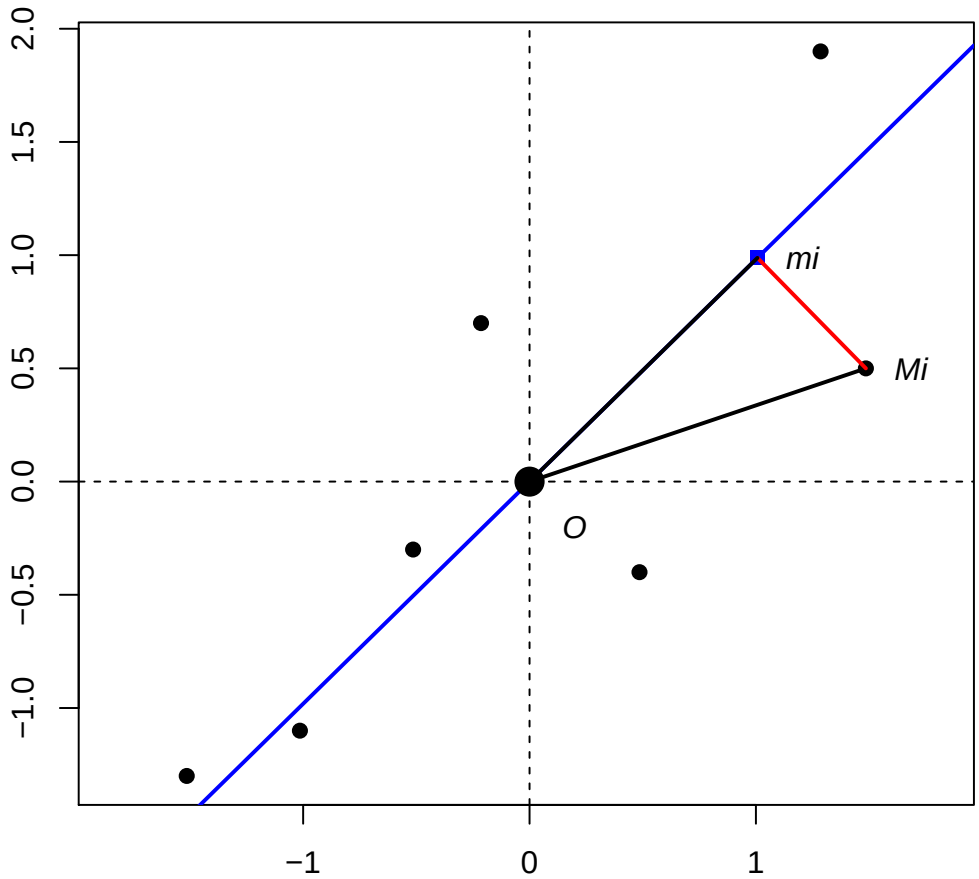
L'étude de la liaison entre $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ est la recherche d'une droite optimum.
Quel est le critère d'optimisation ?

Enoncé (2)

Cette droite minimise

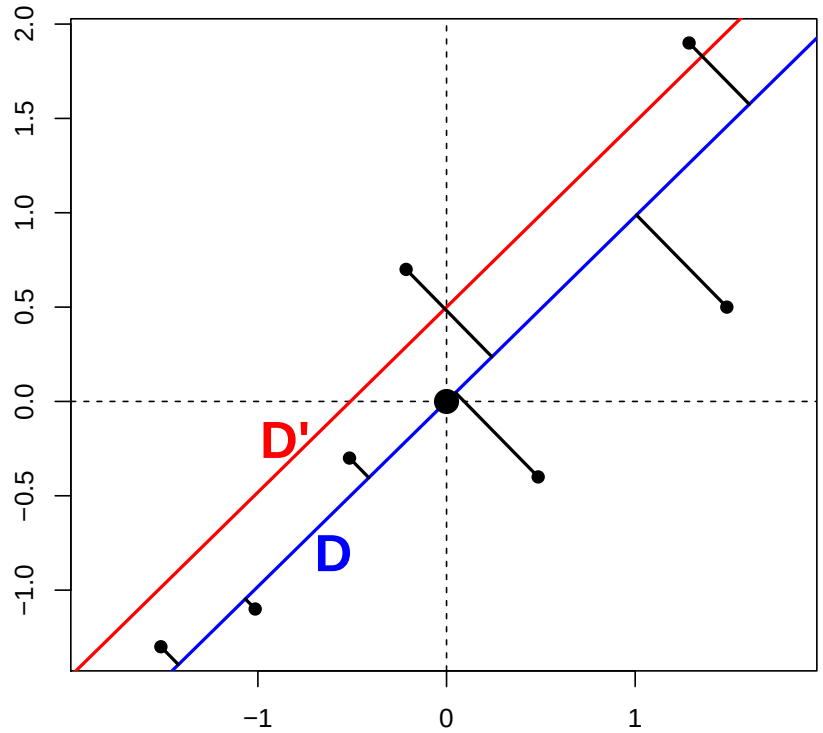
$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} {M_i m_i}^2$$

où
- M_i est le point i du plan,
- m_i est la projection orthogonale de M_i sur la droite.



Elle est dite **direction principale** du nuage centré.

A-ton besoin de centrer le nuage ?



La droite qui minimise la moyenne des carrés des distances des points à cette droite passe par le point moyen de coordonnées $(m(\mathbf{x}), m(\mathbf{y}))$ (conséquence du théorème de Huygens).

Théorème de Huygens

Le moment d'inertie d'un nuage de points par rapport à un axe de rotation D' est égale à la somme du moment d'inertie de ce nuage de points par rapport à l'axe de rotation parallèle D passant par le centre de gravité et du moment d'inertie du centre de gravité par rapport à D'.

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \parallel M_i - m_i' \parallel^2 \quad = \quad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \parallel M_i - m_i \parallel^2 + \parallel w \parallel^2$$

Inertie Totale

1. $\mathbf{X}_0$ est une matrice à n lignes et p colonnes : $\mathbf{X}_0 = \left[x_{ij} - m(\mathbf{x}^j)\right]$ où $\mathbf{x}^j$ est le vecteur associé à la variable j.
2. Chaque point a un poids $\frac{1}{n}$ (pondération uniforme).

L'ensemble des n points forme un nuage dont l'**inertie** autour du centre de gravité vaut :

$$I_T = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \parallel M_i \parallel^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}(x_{ij} - m(\mathbf{x}^j))^2$$

C'est la variabilité totale de la position des points dans l'espace.

Exemple en dimension 2

La droite passe par le point moyen. Donc on place l'origine au centre de gravité en utilisant les nouvelles coordonnées centrées :

$$\begin{cases} X_i = x_i - m(\mathbf{x}) \\ Y_i = y_i - m(\mathbf{y}) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} I_T &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(X_i^2 + Y_i^2\right) \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\left(x_i - m(\mathbf{x})\right)^2 + \left(y_i - m(\mathbf{y})\right)^2\right) \\ &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - m(\mathbf{x})\right)^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - m(\mathbf{y})\right)^2 \\ &= v(\mathbf{x}) + v(\mathbf{y}) \end{aligned}$$

Décomposition de l'inertie totale

Quand on prend dans $\mathbb{R}^p$ un vecteur unitaire $\mathbf{u}$, il définit un axe. Le point M_i se projette sur cet axe en m_i. On a :

$$M_i = m_i + (M_i - m_i) \text{ et } \| M_i \|^2 = \| m_i \|^2 + \| M_i - m_i \|^2$$

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \| M_i \|^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \| m_i \|^2 + \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \| M_i - m_i \|^2$$

$$I_T = I_S(\mathbf{u}) + I_M(\mathbf{u})$$

$$I_T = \underbrace{I_S(\mathbf{u})}_{\text{à maximiser}} + \underbrace{I_M(\mathbf{u})}_{\text{à minimiser}}$$

Recherche du vecteur directeur u

La matrice $\mathbf{X}_0$ contient les n points centrés.

$$\mathbf{X}_0 = \begin{bmatrix} x_1 - m(\mathbf{x}) & y_1 - m(\mathbf{y}) \\ \vdots & \vdots \\ x_n - m(\mathbf{x}) & y_n - m(\mathbf{y}) \end{bmatrix}$$

Le vecteur $\mathbf{u}$ recherché est unitaire. On l'écrit sous la forme $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ avec $a^2 + b^2 = 1$.

Recherche du vecteur directeur u

L'inertie statistique ou inertie projetée est :

$$
\begin{aligned}
I_S(\mathbf{u}) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \| \ m_i \ \|^2 = \frac{1}{n}\left(\mathbf{X}_0\mathbf{u}\right)^T \mathbf{X}_0\mathbf{u} = \mathbf{u}^T\left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_0^T\mathbf{X}_0\right)\mathbf{u} \\
&= \begin{bmatrix} a & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v(\mathbf{x}) & c(\mathbf{x},\mathbf{y}) \\ c(\mathbf{x},\mathbf{y}) & v(\mathbf{y}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \\
&= v(\mathbf{x})a^2 + 2c(\mathbf{x},\mathbf{y})ab + v(\mathbf{y})b^2
\end{aligned}
$$

Recherche du vecteur directeur u

La matrice $\begin{bmatrix} v(\mathbf{x}) & c(\mathbf{x},\mathbf{y}) \\ c(\mathbf{x},\mathbf{y}) & v(\mathbf{y}) \end{bmatrix}$ est dite **matrice de variances-covariances** des deux variables. On la note

$$\mathbf{C} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_0^T\mathbf{X}_0$$

Elle est symétrique. Son polynôme caractéristique s'écrit :

$$\begin{aligned} |\mathbf{C} - \lambda\mathbf{I}_2| &= \begin{vmatrix} v(\mathbf{x}) - \lambda & c(\mathbf{x},\mathbf{y}) \\ c(\mathbf{x},\mathbf{y}) & v(\mathbf{y}) - \lambda \end{vmatrix} && (1) \\ &= \lambda^2 - \lambda\left(v(\mathbf{x}) + v(\mathbf{y})\right) + v(\mathbf{x})v(\mathbf{y}) - c^2(\mathbf{x},\mathbf{y}) && (2) \end{aligned}$$

Recherche du vecteur directeur u

- Le polynôme caractéristique a toujours deux racines donc $\mathbf{C}$ a toujours deux valeurs propres et deux vecteurs propres.
- Les valeurs propres sont en général distinctes. On les note λ_1 et λ_2.
  - $\lambda_1 + \lambda_2 = v(\mathbf{x}) + v(\mathbf{y})$
  - $\lambda_1 \times \lambda_2 = v(\mathbf{x}) \times v(\mathbf{y}) - c^2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$

Toute matrice symétrique admet une base de vecteurs propres orthogonaux. Donc,

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T$$

avec $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{21} \\ u_{12} & u_{22} \end{bmatrix}$ et $\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$

Recherche du vecteur directeur u

$$
\begin{aligned}
I_S(\mathbf{u}) &= \mathbf{u}^T \mathbf{C} \mathbf{u} \\
&= [a \quad b] \begin{bmatrix} u_{11} & u_{21} \\ u_{12} & u_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \\
&= [\alpha \quad \beta] \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \\
&= \lambda_1 \alpha^2 + \lambda_2 \beta^2 \leq \lambda_1 \alpha^2 + \lambda_1 \beta^2 = \lambda_1
\end{aligned}
$$

$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ représente les coordonnées du vecteur $\mathbf{u}$ dans la base des vecteurs propres.

Recherche du vecteur directeur u

L'inertie ne peut dépasser la première valeur propre et l'atteint pour $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, donc le premier vecteur propre.

Conclusion dans le cas de 2 variables :

L'axe principal d'un nuage bivarié est le premier vecteur propre de la matrice de variance-covariance des deux variables.

Généralisation à p variables

$\mathbf{C} = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T$ admet une base de p vecteurs propres orthonormés.

- Le premier vecteur propre normé $\mathbf{u}_1$ est un vecteur de $\mathbb{R}^p$ qui maximise l'inertie projetée.
- Le deuxième vecteur propre normé $\mathbf{u}_2$ est un vecteur de $\mathbb{R}^p$, orthogonal à $\mathbf{u}_1$, qui maximise à nouveau l'inertie projetée.
- et ainsi de suite pour $\mathbf{u}_3 \dots \mathbf{u}_r$ axes suivants où r représente le rang de la matrice diagonalisée.

Coordonnées des projections

Si $\mathbf{u}_k$ est le vecteur propre de rang k, les coordonnées des projections des n points sont obtenus simplement par :

$$\mathbf{l}_k = \begin{bmatrix} l_{1k} \\ \vdots \\ l_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle M_1 | \mathbf{u}_k \rangle \\ \vdots \\ \langle M_n | \mathbf{u}_k \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{p} (x_{1j} - m(\mathbf{x}^j)) u_{jk} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{p} (x_{nj} - m(\mathbf{x}^j)) u_{jk} \end{bmatrix}$$

soit en écriture matricielle : $\mathbf{l}_k = \mathbf{X}_0 \mathbf{u}_k$.

Axes principaux et coordonnées

- $\mathbf{u}_k$ est appelé **axe principal** de rang k.
- $\mathbf{l}_k$ est appelé vecteur des **coordonnées** sur l'axe principal. C'est une variable artificielle de moyenne nulle et de variance λ_k.

$$\begin{aligned} m(\mathbf{l}_k) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l_{ik} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{p}(x_{ij} - m(\mathbf{x}^j))\,u_{jk} \\ &= \sum_{j=1}^{p} u_{jk}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_{ij} - m(\mathbf{x}^j)) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v(\mathbf{l}_k) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} l_{ik}^2 = \frac{1}{n}\left(\mathbf{X}_0\mathbf{u}_k\right)^T\mathbf{X}_0\mathbf{u}_k = \mathbf{u}_k^T\mathbf{C}\mathbf{u}_k \\ &= \lambda_k\mathbf{u}_k^T\mathbf{u}_k = \lambda_k \end{aligned}$$

Le graphe des valeurs propres

- La coordonnées sur l'axe de rang k est donc centrée de variance λ_k.
- La somme des valeurs propres est l'inertie totale.

$$\sum_{j=1}^{p} \lambda_j = \sum_{j=1}^{p} v(\mathbf{x}^j)$$

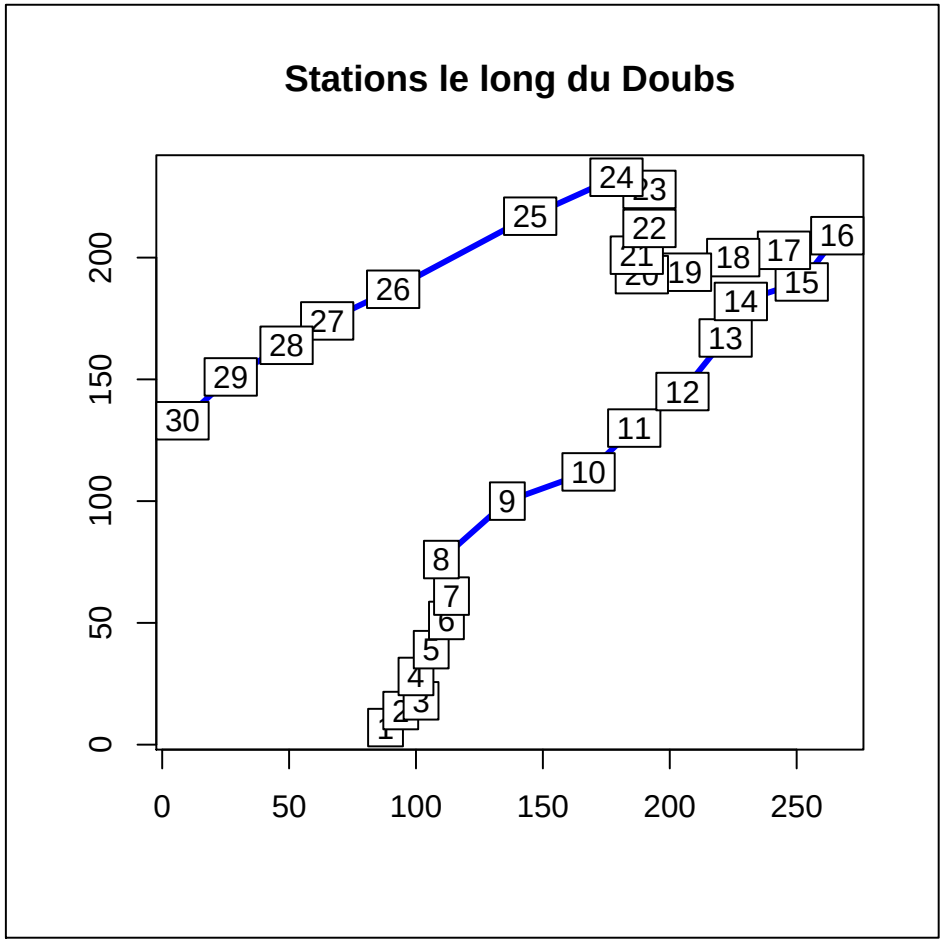
où $\mathbf{x}^j$ est la variable j du tableau $\mathbf{X}$.

Le graphe des valeurs propres exprime la manière dont la variabilité des données se répartit dans l'espace.
C'est une représentation en bâtons avec k sur l'axe horizontal et λ_k sur l'axe vertical . En anglais, on parle de `screeplot`.

La carte factorielle

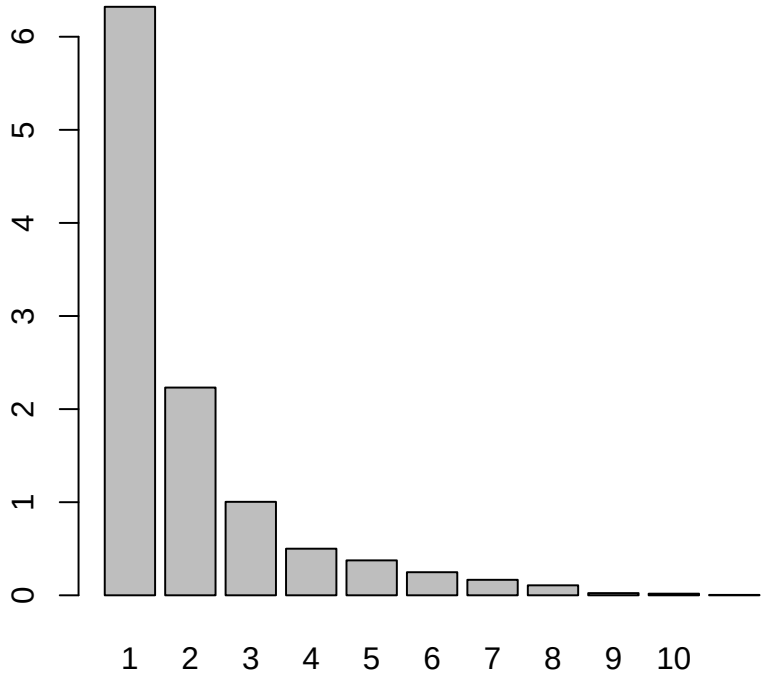
La représentation du nuage projeté sur un couple d'axes principaux est appelée **carte factorielle**. C'est une manière de voir l'information multidimensionnelle.
La carte factorielle des axes 1 et 2 est dite premier plan factoriel et représente la part maximale de la variabilité. Chaque point i est positionné par ses deux coordonnées (l_{i1}, l_{i2}).

Exemple écologique

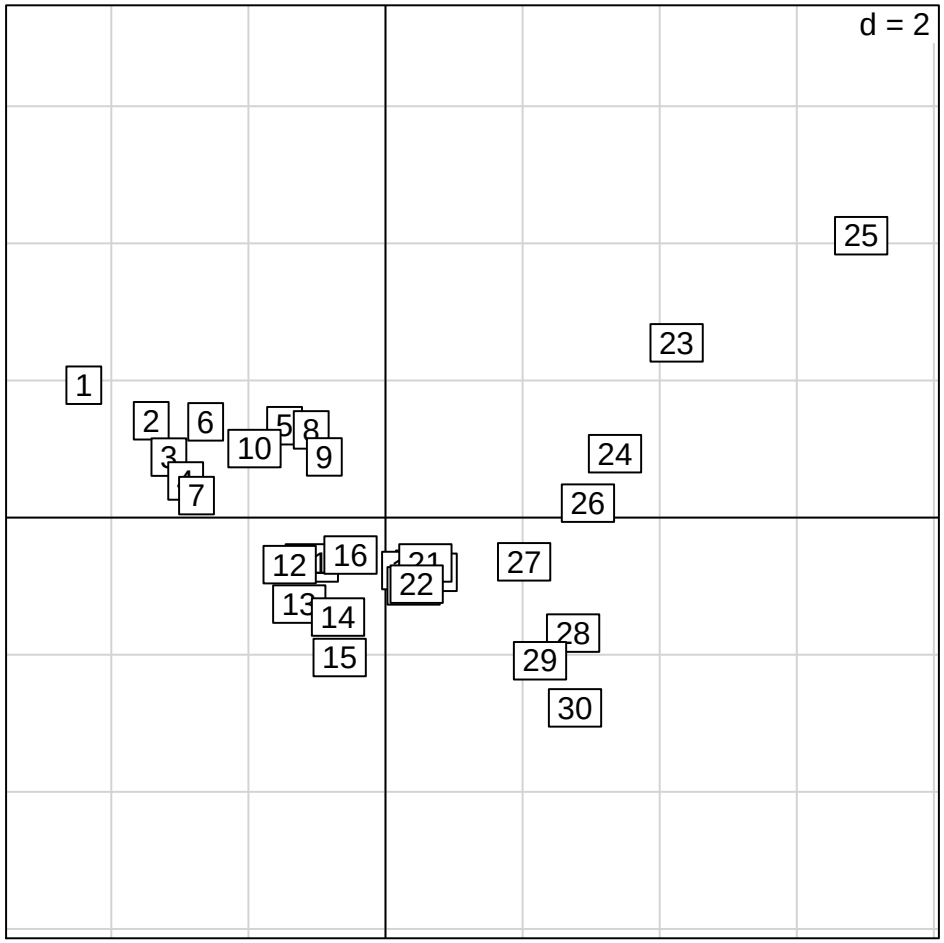


11 variables physico-chimiques :
distance à la source, altitude, pente
débit, pH, dureté de l'eau
phosphate, nitrate, ammoniaque
oxygène, demande biologique en
oxygène

Graphe des valeurs propres



Représentation des individus - stations

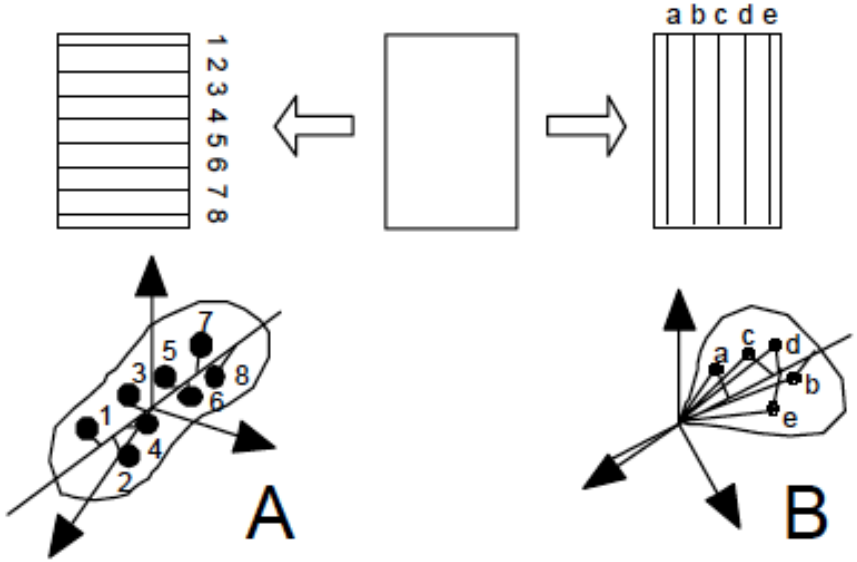


Situation B

Représentation des variables dans l'espace des individus

Retour à l'énoncé du problème

On vient d'étudier la projection d'un nuage de n points sur des axes qui maximisent l'inertie projetée (situation A).



On s'intéresse maintenant à l'ensemble de p points dans $\mathbb{R}^n$ (situation B).

Enoncé (1)

Le point de vue de cette analyse a été proposé par Hotelling (1933) dans le cas où les données sont centrées réduites.
Soit $\mathbf{y}$ une variable quelconque. On peut calculer sa corrélation avec chacune des variables de départ $\mathbf{x}^j$ $(j = 1, p)$. Le lien entre $\mathbf{y}$ et $\mathbf{X}$ peut se mesurer par la relation :

$$\mathcal{L}(\mathbf{y}, \mathbf{X}) = \sum_{j=1}^{p} r^2\left(\mathbf{y}, \mathbf{x}^j\right)$$

Objectif : Trouver une variable $\mathbf{y}$ qui optimise cette quantité.
Le problème reste inchangé si on suppose $\mathbf{y}$ de moyenne nulle et de variance 1.

Enoncé (2)

$r^2\left(\mathbf{y}, \mathbf{x}^k\right)$ est :

- le carré de la norme du projeté de $\mathbf{y}$ sur le vecteur $\mathbf{x}_\bullet^k$, vecteur centré réduit,
- le carré de la norme du projeté de $\mathbf{x}_\bullet^k$ sur le vecteur $\mathbf{y}$.

Le lien est alors l'inertie projetée du nuage des variables sur $\mathbf{y}$ en pensant que le poids de chaque variable est 1 et que le produit scalaire de $\mathbb{R}^n$ est $\mathbf{D} = \frac{1}{n}\mathbf{I}_n$.
C'est donc le même problème que précédemment.

Données centrées réduites

Reprenant les résultats de la représentation des individus lorsque les variables du tableau $\mathbf{X}$ sont centrées réduites. Il est alors noté $\mathbf{X}_\bullet$.
On cherche les axes principaux, vecteurs propres de la matrice $\frac{1}{n}\mathbf{X}_\bullet^T\mathbf{X}_\bullet$.
On est passé de la matrice de variance-covariance $\mathbf{C}$ à la matrice des corrélations $\mathbf{R}$.

$$\mathbf{R} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_\bullet^T\mathbf{X}_\bullet = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T \text{ et } \mathbf{L} = \mathbf{X}_\bullet\mathbf{U}$$

Recherche du vecteur y

$$\mathcal{L}(\mathbf{y}, \mathbf{X}) = \sum_{k=1}^{p} r^2\left(\mathbf{y}, \mathbf{x}_\bullet^k\right) = 1\langle \mathbf{y} | \mathbf{x}_\bullet^k \rangle^2$$

$$\mathcal{L}(\mathbf{y}, \mathbf{X}) = \left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_\bullet^T\mathbf{y}\right)^T\left(\frac{1}{n}\mathbf{X}_\bullet^T\mathbf{y}\right) = \frac{1}{n^2}\mathbf{y}^T\mathbf{X}_\bullet\mathbf{X}_\bullet^T\mathbf{y}$$

On cherche $\mathbf{y}$ normé pour le produit scalaire $\mathbf{D}$ sous la contrainte $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^2 = 1$.

Recherche du vecteur y

On note que $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^2$ peut s'écrire $=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{\sqrt{n}}y_i\right)^2$.

On pose donc $\mathbf{z} = \frac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{y}$ et on cherche $\mathbf{z}$ normé pour le produit scalaire ordinaire maximisant :

$$\frac{1}{n}\mathbf{z}^T\mathbf{X}_\bullet\mathbf{X}_\bullet^T\mathbf{z}$$

On pose $\mathbf{S} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_\bullet\mathbf{X}_\bullet^T$. C'est une matrice symétrique qui admet une base de vecteurs propres orthogonaux :

$$\mathbf{S} = \mathbf{V}\Lambda\mathbf{V}^T$$

Vecteurs propres de S

$$\mathbf{SL} = \frac{1}{n}\mathbf{X_\bullet X_\bullet^T X_\bullet U} = \mathbf{X_\bullet RU} = \mathbf{X_\bullet U\Lambda} = \mathbf{L\Lambda}$$

- Les matrices $\mathbf{S}$ et $\mathbf{R}$ ont les mêmes valeurs propres non nulles.
- Les vecteurs que l'on cherche sont connus : à une constante de normalisation près, les coordonnées des individus sur les axes principaux.

$$\mathbf{V} = \mathbf{L}\Lambda^{-1/2}$$

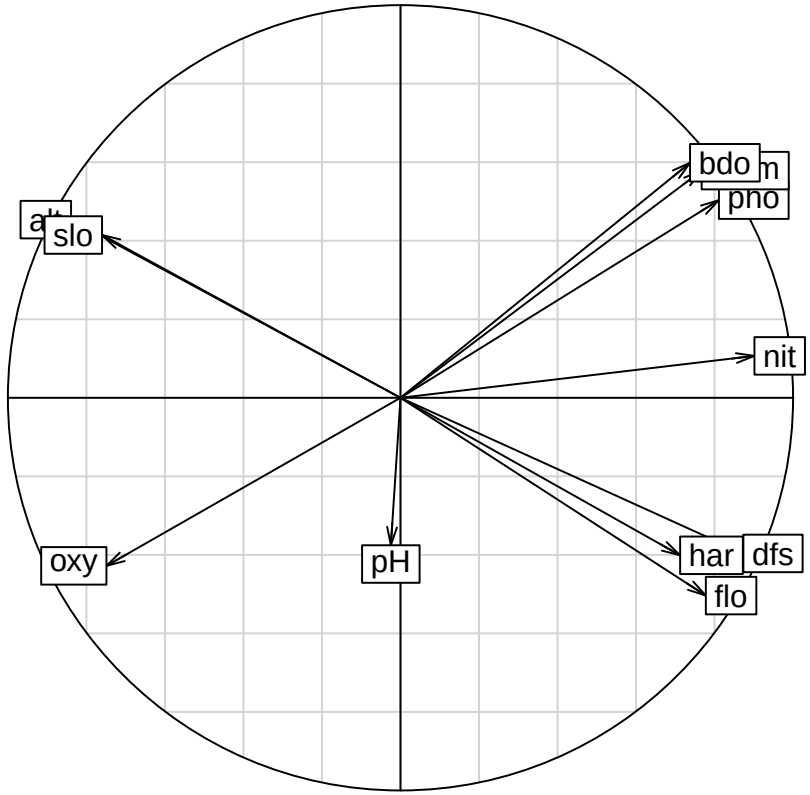
Solution et représentation graphique

$\mathcal{L}(\mathbf{y}, \mathbf{X})$ ne peut pas dépasser λ_1 et l'atteint pour la variable normée $\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}\mathbf{l}_1$.
Ce vecteur est appelé **première composante principale**. C'est la variable qui est la plus corrélée avec toutes les variables du tableau.
Quand on projette les variables sur les composantes principales, on obtient les coordonnées des variables.

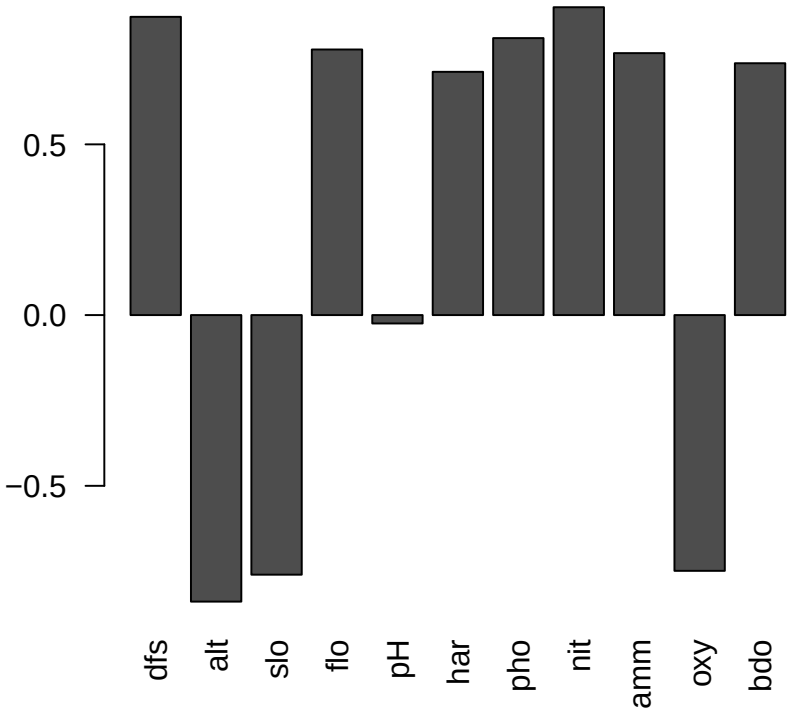
$$\mathbf{K} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_{\bullet}^{T}\mathbf{L}\Lambda^{-1/2} = \frac{1}{n}\mathbf{X}_{\bullet}^{T}\mathbf{X}_{\bullet}\mathbf{U}\Lambda^{-1/2} = \mathbf{R}\mathbf{U}\Lambda^{-1/2} = \mathbf{U}\Lambda^{1/2}$$

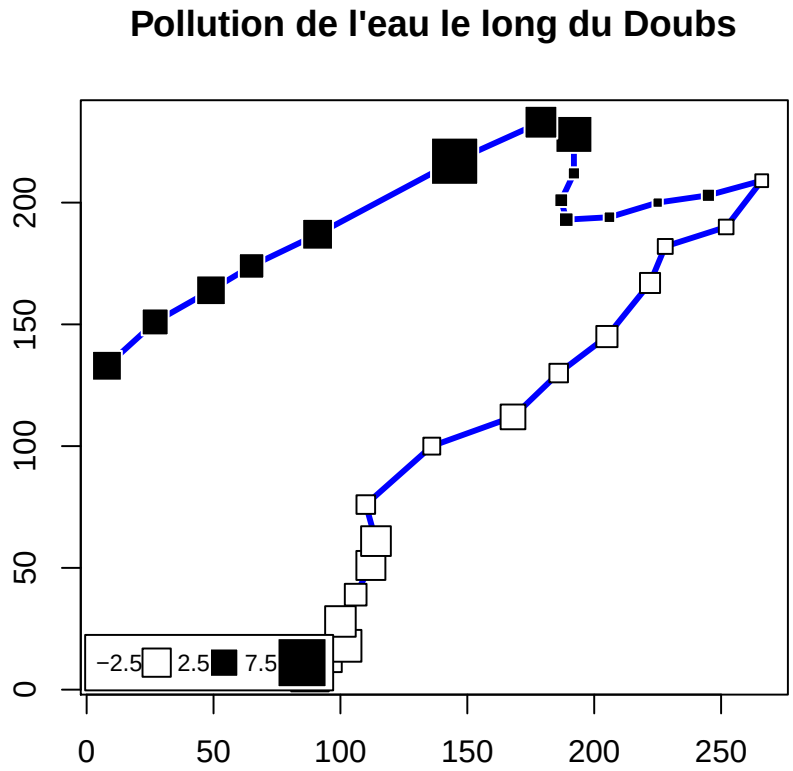
La représentation liant variables et composantes principales est appelée **cercle des corrélations**.

Représentation des variables physico-chimiques



Exemple écologique (5)





Conclusion

L'Analyse en Composantes Principales dite A.C.P. est l'étude du triplet $\left(\mathbf{X}, \mathbf{I}_p, \frac{1}{n}\mathbf{I}_n\right)$.

- Si les données sont centrées, on parle d' **ACP centrée**.
- Si les données sont normées, on parle d' **ACP normée**.