Université de Technologie de Compiègne SY09 : Analyse des données et Apprentissage automatique

SY09 : TP 03 : Représentation Euclidienne des Données

Julien Jerphanion

Printemps 2018

Table des matières

1		orésentation euclidienne	2
	1.1	Représentation des données	2
		1.1.1 Identification des groupes d'élèves en fonction des résultats scolaires	6
	1.2	Projection et qualité de réprésentation	8
		1.2.1 Premier changement de base	8
		1.2.2 Second changement de base	12
		1.2.3 Troisième changement de base	16
	1.3	Choix d'une représentation	20
2	Que	estion Théorique	21
	2.1	Relation entre inertie et trace de la matrice de covariance empirique	21
	2.2	Invariance de la trace par permutation circulaire	22
	2.3	Préservation du centrage par changement de bases	23
	2.4	Préservation de l'inertie du nuage de points par changement de bases orthonormées	23

1 Représentation euclidienne

1.1 Représentation des données

Ici, nous allons nous intéresser à un jeu de données contenant les notes de 9 individus (n = 9) pour 5 matières (p = 5):

```
math: mathématiques;
scie: sciences « naturelles »
fran: français
lati: latin
d.m: « arts »
```

On veut trouver une base de representation permettant de visualiser les données de la meilleure façon possible.

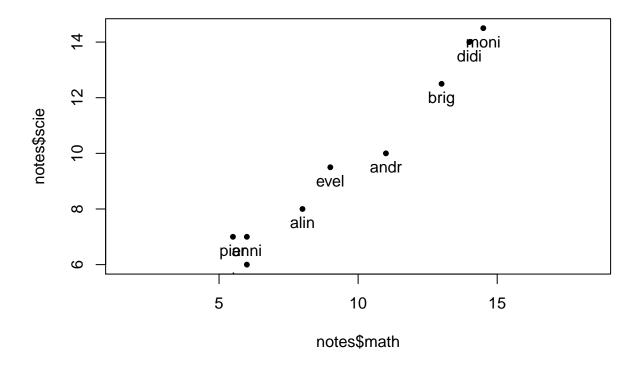
On peut, tout d'abord, charger les données ainsi:

```
notes = read.table("donnees/notes.txt", header = TRUE)
notes
```

```
##
       math scie fran lati d.m
## jean 6.0 6.0 5.0
                      5.5
## alin
       8.0 8.0 8.0
                      8.0
       6.0 7.0 11.0 9.5
## moni 14.5 14.5 15.5 15.0
## didi 14.0 14.0 12.0 12.5
## andr 11.0 10.0 5.5 7.0
## pier 5.5 7.0 14.0 11.5
                           10
## brig 13.0 12.5 8.5 9.5
                           12
## evel 9.0 9.5 12.5 12.0 18
```

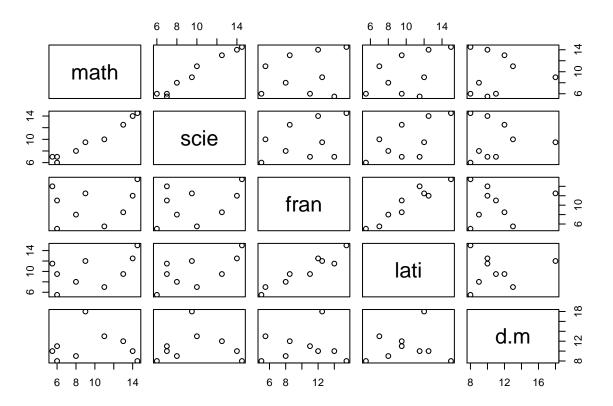
Pour se donner un premier aperçu, on peut plotter deux séries de notes ainsi – avec ici les sciences en fonction des maths:

```
plot(notes$math, notes$scie, pch=20, asp=1)
text(notes[,c("math","scie")], row.names(notes), pos=1)
```



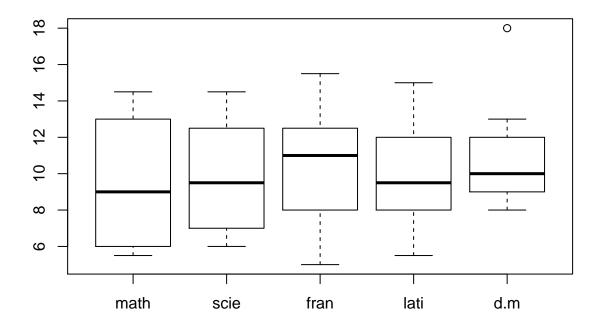
On peut, de manière plus générale, générer un ensemble de graphes de dispersion pour avoir une meilleure intuition:

plot(notes)



Ici, on peut voir que math et scie semblent être corrélés. Cela est aussi vrai pour fran et lati. d.m ne semble pas particulièrement être corrélé avec le reste.

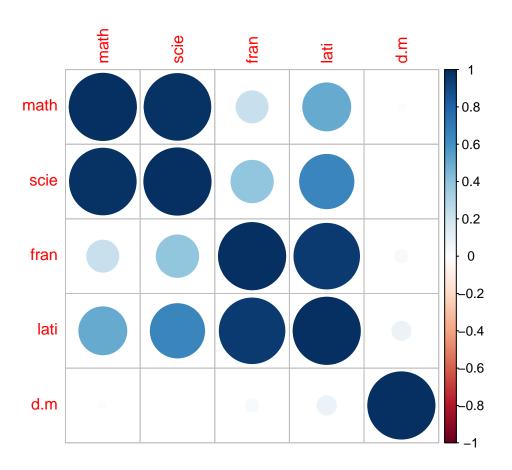
On peut utiliser des boîtes à moustaches pour avoir rapidement un aperçu univarié de chaque variable. boxplot(notes)



Après avoir tracé ces quelques diagrammes et représentations graphiques, on peut s'intéresser à la corrélation des variables:

Ce résultat sous forme numérique ne laisse que difficilement percevoir les tendance. Pour pallier à ce problème, on peut représenter cette matrice sous la forme d'une *heatmap* pour avoir un visuel plus probant que des données chiffrées. On utilise pour ce faire, la fameuse bibliothèque corrplot.

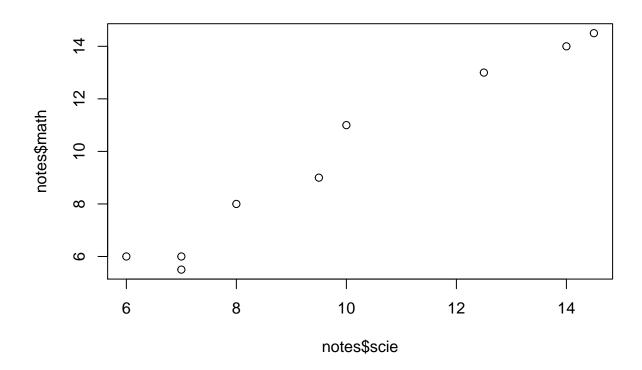
```
library(corrplot)
## corrplot 0.84 loaded
corrplot(cor(notes))
```



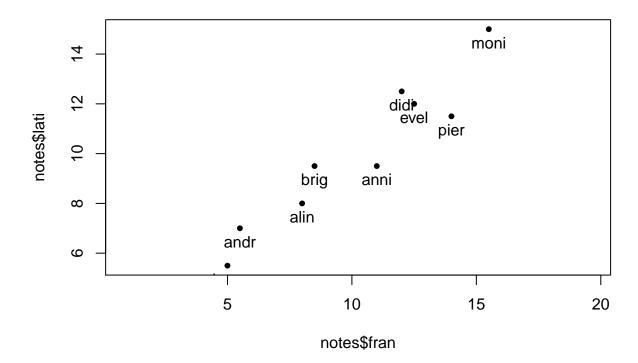
On voit facilement que les matières scientiques sont fortement corrélées ; il en est de même pour les matières littéraires. En revanche les matières artistiques, ne semblent pas être corrélés avec d'autres matières.

1.1.1 Identification des groupes d'élèves en fonction des résultats scolaires

plot(notes\$math~notes\$scie)



```
plot(notes$fran, notes$lati, pch=20, asp=1)
text(notes[,c("fran","lati")], row.names(notes), pos=1)
```



1.2 Projection et qualité de réprésentation

1.2.1 Premier changement de base

Soit la matrice A_1 suivante:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 10 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Les colonnes de A_1 sont orthogonales donc linéairement indépendantes ; puisque A_1 est carrée, elle définit donc une base.

On peut la représenter dans R ainsi:

```
A1 = matrix(c(1, 0, 1, 0, 0,

1, 0,-1, 0, 0,

0, 1, 0, 1, 0,

0, 1, 0,-1, 0,

0, 0, 0, 0, 0, 2)/2,

ncol = 5,

byrow = TRUE)
```

```
##
        [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]
         0.5
              0.0 0.5
                        0.0
              0.0 - 0.5
  [2,]
         0.5
## [3,]
         0.0
              0.5
                                0
                   0.0
                         0.5
## [4,]
         0.0
              0.5
                   0.0 -0.5
                                0
              0.0 0.0 0.0
## [5,]
         0.0
                                1
```

Dès lors, on peut vérifier que A_1 définit bien une base en montrant que son déterminant est non nul.

```
det(A1)
```

```
## [1] -0.25
```

On peut alors chercher à représenterles notes dans la nouvelle base A_1 . Ce changement de base peut se faire avec une multiplication de matrices.

Pour cela on crée la matrice X des notes:

```
X = data.matrix(notes, rownames.force = NA)
X
##
       math scie fran lati d.m
## jean
        6.0 6.0
                 5.0
                       5.5
## alin
        8.0
             8.0 8.0
                       8.0
             7.0 11.0
## anni
        6.0
                       9.5
                            11
## moni 14.5 14.5 15.5 15.0
## didi 14.0 14.0 12.0 12.5
## andr 11.0 10.0 5.5 7.0
## pier 5.5 7.0 14.0 11.5
## brig 13.0 12.5 8.5 9.5
                            12
## evel 9.0 9.5 12.5 12.0
```

Dans la suite, on aura besoin de l'inverse de A_1 , que l'on calcule ici:

```
AInv = solve(A1)
AInv
```

```
[,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
##
## [1,]
            1
                  1
                        0
                               0
## [2,]
            0
                   0
                               1
                                    0
                         1
## [3,]
             1
                 -1
                        0
                               0
                                    0
## [4,]
            0
                  0
                        1
                             -1
                                    0
## [5,]
```

Et on peut maintenant passer de la base canonique sous-jacente:

```
XA = X %*% t(AInv)
XA
```

```
[,1] [,2] [,3] [,4]
                            [,5]
## jean 12.0 10.5 0.0 -0.5
                               8
## alin 16.0 16.0 0.0 0.0
                               9
## anni 13.0 20.5 -1.0
                        1.5
                              11
## moni 29.0 30.5 0.0
                        0.5
                               8
## didi 28.0 24.5
                  0.0 - 0.5
                              10
## andr 21.0 12.5 1.0 -1.5
                              13
## pier 12.5 25.5 -1.5 2.5
                              10
## brig 25.5 18.0 0.5 -1.0
                              12
## evel 18.5 24.5 -0.5 0.5
```

On peut se ramener à la base initiale en utilisant A_1 ainsi

```
XInit = XA %*% t(A1)
XInit == X

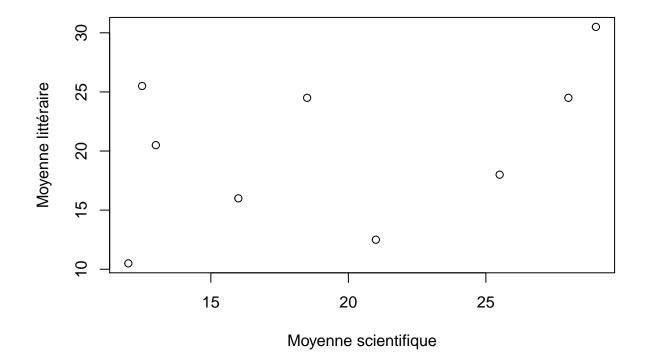
##    [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## jean TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
## alin TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
## anni TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
## moni TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
## didi TRUE TRUE TRUE TRUE TRUE
## andr TRUE TRUE TRUE TRUE
## pier TRUE TRUE TRUE TRUE
## prig TRUE TRUE TRUE TRUE
## brig TRUE TRUE TRUE TRUE
## evel TRUE TRUE TRUE TRUE
```

Les données que l'on obtient dans la base définie par A_1 représentent, pour chaque individu:

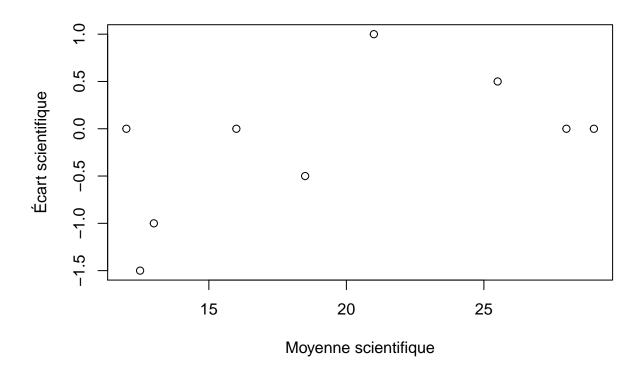
- la moyenne de ses notes des matières scientifiques
- la moyenne de ses notes des matières littéraires
- l'écart normalisé entre ses moyennes de math et de sci
- l'écart normalisé entre ses moyennes de fran et de lati
- sa moyenne d'arts

On peut représenter les composantes (X^1, X^2) , ainsi que les composantes (X^1, X^3) :

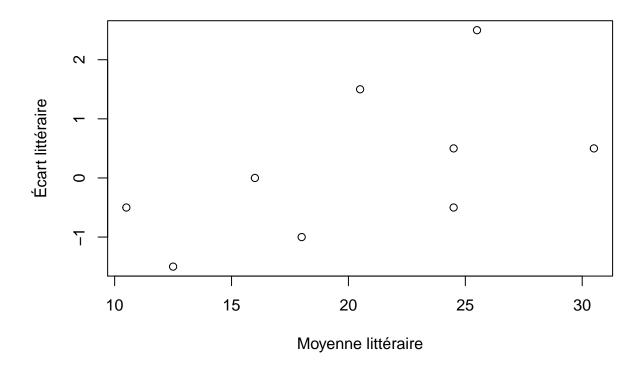
```
plot(XA[,1],XA[,2],xlab = "Moyenne scientifique", ylab = "Moyenne littéraire")
```



```
plot(XA[,1],XA[,3],xlab = "Moyenne scientifique", ylab = "Écart scientifique")
```



plot(XA[,2],XA[,4],xlab = "Moyenne littéraire", ylab = "Écart littéraire")



1.2.2 Second changement de base

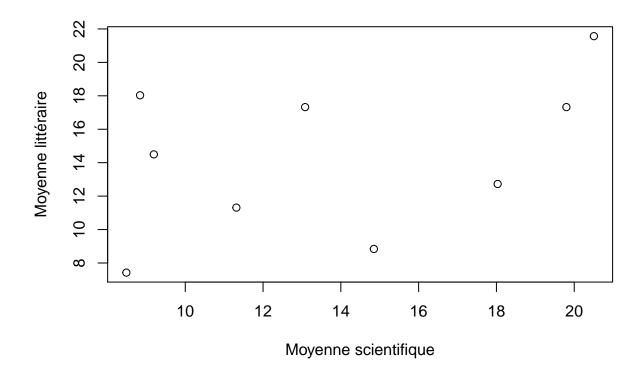
On considère maintenant la matrice B_1 suivante:

$$B_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

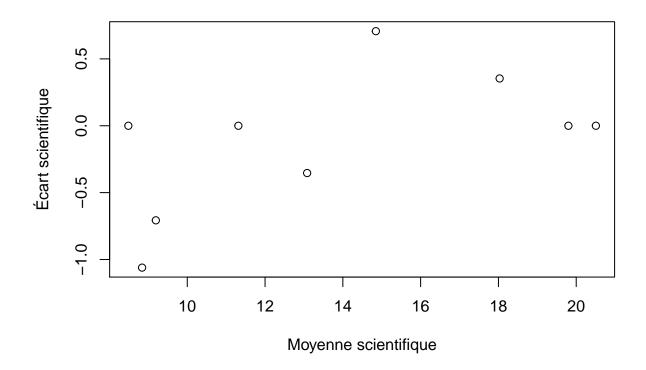
Elle définit aussi une base car elle est orthogonale ; voyez-plutôt:

```
B1 = matrix(c(1, 0, 1, 0, 0,
              1, 0,-1, 0, 0,
              0, 1, 0, 1, 0,
              0, 1, 0,-1, 0,
              0, 0, 0, 0, 2/sqrt(2))*sqrt(2)/2,
            ncol = 5,
            byrow = TRUE)
B1
##
             [,1]
                        [,2]
                                   [,3]
                                               [,4] [,5]
## [1,] 0.7071068 0.0000000
                              0.7071068
                                         0.0000000
                                                       0
## [2,] 0.7071068 0.0000000 -0.7071068
                                                       0
                                         0.0000000
## [3,] 0.0000000 0.7071068 0.0000000
                                         0.7071068
                                                       0
```

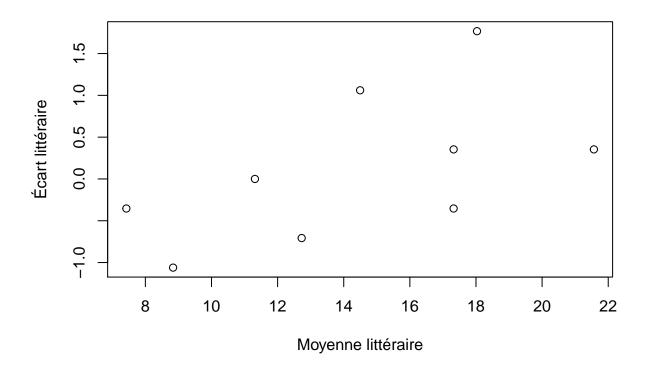
```
## [4,] 0.0000000 0.7071068 0.0000000 -0.7071068
1
round(t(B1) %*% B1,3)
       [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]
          1
              0
                   0
## [2,]
          0
              1
                   0
                        0
                            0
## [3,]
          0
              0
                        0
                            0
                   1
## [4,]
          0
              0
                   0
                        1
## [5,]
              0
                   0
  On peut changer de base comme tout à l'heure:
B1Inv = t(B1)
B1Inv
##
            [,1]
                      [,2]
                               [,3]
                                          [,4] [,5]
## [1,] 0.7071068 0.7071068 0.0000000 0.0000000
## [2,] 0.0000000 0.0000000 0.7071068 0.7071068
                                                 0
## [3,] 0.7071068 -0.7071068 0.0000000 0.0000000
                                                 0
## [4,] 0.0000000 0.0000000 0.7071068 -0.7071068
1
XB1 = X %*% B1
XB1
##
            [,1]
                     [,2]
                                  [,3]
                                             [,4] [,5]
## jean 8.485281 7.424621 2.220446e-16 -0.3535534
## alin 11.313708 11.313708 0.000000e+00 0.0000000
                                                    9
## anni 9.192388 14.495689 -7.071068e-01 1.0606602
                                                   11
## moni 20.506097 21.566757 3.885781e-16 0.3535534
                                                    8
## didi 19.798990 17.324116 -6.661338e-16 -0.3535534
                                                   10
## andr 14.849242 8.838835 7.071068e-01 -1.0606602
## pier 8.838835 18.031223 -1.060660e+00 1.7677670
                                                   10
## brig 18.031223 12.727922 3.535534e-01 -0.7071068
                                                   12
## evel 13.081475 17.324116 -3.535534e-01 0.3535534
                                                   18
plot(XB1[,1],XB1[,2],xlab = "Moyenne scientifique", ylab = "Moyenne littéraire")
```



plot(XB1[,1],XB1[,3],xlab = "Moyenne scientifique", ylab = "Écart scientifique")



plot(XB1[,2],XB1[,4],xlab = "Moyenne littéraire", ylab = "Écart littéraire")



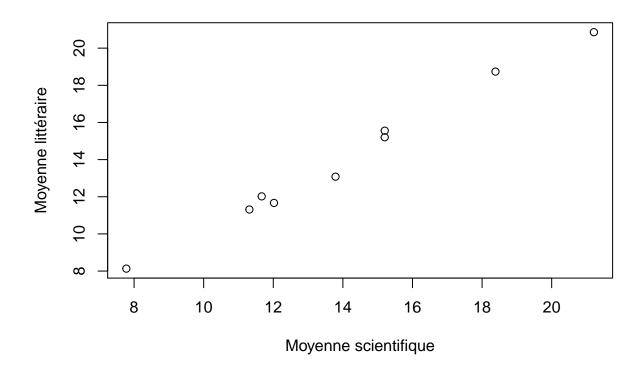
1.2.3 Troisième changement de base

$$B_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

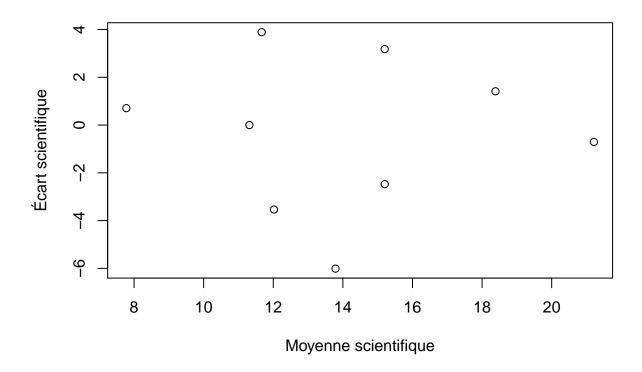
```
##
           [,1]
                   [,2]
                             [,3]
                                      [,4] [,5]
## [1,] 0.7071068 0.0000000
                        0.7071068
                                 0.0000000
                                             0
## [2,] 0.0000000 0.7071068
                        0.0000000
                                 0.7071068
                                             0
## [3,] 0.7071068 0.0000000 -0.7071068
                                 0.0000000
                                             0
## [4,] 0.0000000 0.7071068 0.0000000 -0.7071068
                                             0
```

Cette matrice est orthogonale:

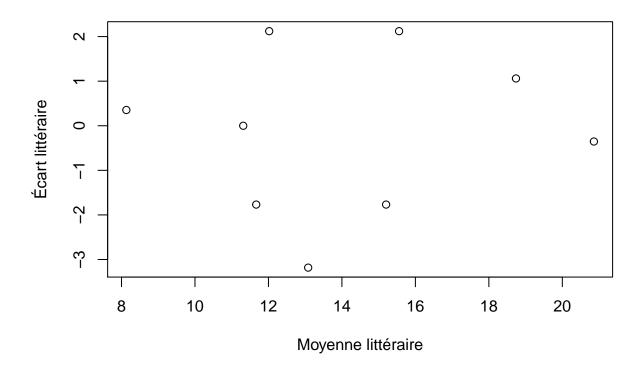
```
round(t(B2) %*% B2,3)
       [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]
         1
              0
                    0
                      0
## [2,]
                         0
                              0
          0
                    0
## [3,]
                              0
          0
               0
                    1
                         0
## [4,]
          0
               0
                    0
                         1
                              0
## [5,]
          0
               0
                    0
                              1
  Elle définit une base à laquelle on peut se reporter:
B2Inv = t(B2)
B2Inv
##
            [,1]
                      [,2]
                                [,3]
                                           [,4] [,5]
## [1,] 0.7071068 0.0000000 0.7071068 0.0000000
## [2,] 0.0000000 0.7071068 0.0000000 0.7071068
## [3,] 0.7071068 0.0000000 -0.7071068 0.0000000
                                                   0
## [4,] 0.0000000 0.7071068 0.0000000 -0.7071068
                                                   0
1
XB2 = X %*% B2
XB2
##
            [,1]
                      [,2]
                                 [,3]
                                           [,4] [,5]
## jean 7.778175 8.131728 0.7071068 0.3535534
## alin 11.313708 11.313708 0.0000000 0.0000000
                                                   9
## anni 12.020815 11.667262 -3.5355339 -1.7677670
                                                  11
## moni 21.213203 20.859650 -0.7071068 -0.3535534
                                                  8
## didi 18.384776 18.738330 1.4142136 1.0606602
                                                  10
## andr 11.667262 12.020815 3.8890873 2.1213203
## pier 13.788582 13.081475 -6.0104076 -3.1819805
                                                  10
## brig 15.202796 15.556349 3.1819805 2.1213203
## evel 15.202796 15.202796 -2.4748737 -1.7677670
                                                  18
plot(XB2[,1], XB2[,2], xlab = "Moyenne scientifique", ylab = "Moyenne littéraire")
```



plot(XB2[,1], XB2[,3], xlab = "Moyenne scientifique", ylab = "Écart scientifique")



plot(XB2[,2], XB2[,4], xlab = "Moyenne littéraire", ylab = "Écart littéraire")



1.3 Choix d'une représentation

Quantité d'inertie du nuage de points expliquée par chacun des axes, si l'on considère la base canonique de \mathbb{R}^5 ? Quelle est la quantité d'inertie totale du nuage de points?

```
G = apply(X = X,FUN = mean, MARGIN = 2)
G
##
        math
                  scie
                            fran
                                      lati
             9.833333 10.222222 10.055556 11.000000
   9.666667
XCentre = X - G
XCentre
##
             math
                        scie
                                  fran
                                            lati
                                                        d.m
## jean -3.666667 -5.0000000 -5.055556 -4.722222 -1.8333333
## alin -1.833333 -1.6666667 -3.000000 -2.055556 -1.2222222
## anni -4.222222 -2.8333333
                              1.333333 -1.500000
                                                  0.9444444
## moni
         4.44444
                  4.2777778
                              5.666667
                                        5.333333 -3.0000000
## didi
        3.000000 3.9444444
                              1.777778
                                        2.666667
                                                  0.3333333
         1.333333 -1.0000000 -4.555556 -3.222222
## andr
## pier -4.333333 -2.6666667 3.000000
                                        1.444444 -0.2222222
## brig 2.777778 2.6666667 -1.166667 -1.500000
## evel -1.055556 -0.7222222 2.666667
                                        2.333333
                                                 7.0000000
XNorms = apply(X = XCentre, FUN = function(x) sum(x^2), MARGIN = 1)
XNorms
```

```
##
                                                 didi
        jean
                  alin
                            anni
                                      moni
                                                           andr
                                                                     pier
   89.66358 20.85802 30.77469 107.60802 34.94136
                                                       43.94136
                                                                37.02469
##
##
        brig
              63.19136
   22.21914
##
I_g = sum(XNorms) / (9 - 1)
I_g
```

[1] 56.27778

On peut aussi refaire cela avec la matrix de covariance:

```
covMat = cov.wt(X)
sum(diag(covMat$cov)) # method = "ML" pour changer l'estimateur
```

```
## [1] 55.09722
inertia = function(X) {
   Xs = scale(X,center = TRUE, scale = FALSE)
   Xsum = apply(X = Xs, FUN = function(x) sum(x^2), MARGIN = 1)
   inert = mean(Xsum)
   inert
}
```

L'inertie est la même pour des bases orthonormées :

```
inertia(X)
## [1] 48.97531
inertia(XB1)
## [1] 48.97531
inertia(XB2)
## [1] 48.97531
```

2 Question Théorique

On considère un nuage de points de coordonnées X exprimées dans un espace euclidien. On suppose que les individus ont tous le même poids.

2.1 Relation entre inertie et trace de la matrice de covariance empirique

QUESTION : Montrer que l'inertie I_X d'un nuage de points de coordonnées X est égale à la trace de sa matrice de covariance empirique (non corrigée) Σ_X .

On a:

$$(\Sigma_X)_{i,j} = X^\top X$$

$$(\Sigma_X)_{i,j} = \begin{cases} Cov(X_i, X_j) & \text{si } i \neq j \\ Var(X_i) & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ainsi:

$$trace(\Sigma_X) = \sum_{j=1}^{n} (\Sigma_X)_{j,j} = \sum_{j=1}^{n} Var(X_j) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} ||X_j||_2^2 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} ||x_{ij} - \bar{x}_j||_2^2$$

C'est à dire par inversion des sommes :

$$trace(\Sigma_X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} ||x_i - \bar{x}||_2^2$$

Or puisque $\bar{x} = g$ avec g le centre de gravité de \mathcal{N}_X on a:

$$trace(\Sigma_X) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n} d^2(x_i, g)$$

C'est à dire par la définition de l'inertie de \mathcal{N}_X :

$$trace(\Sigma_X) = I_X$$

2.2 Invariance de la trace par permutation circulaire

QUESTION: Montrer l'invariance de la trace par permutation circulaire, i.e. pour trois matrices A, B et C: trace(ABC) = trace(CAB).

Soit A, B et C trois matrices de $\mathbb{R}^{n \times n}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

Soit i et j deux entiers naturels inférieurs à n, on a :

$$(ABC)_{i,j} = \underline{(AB)_i}C_j$$

Soit k un autre entier naturel inférieur à n, on a:

$$\underline{(AB)_{i_k}} = \underline{A}_i B_k = \sum_{l=1}^n A_{i,l} B_{l,k}$$

Ainsi:

$$(ABC)_{i,j} = \left[\sum_{l} A_{i,l} B_{l,1} \sum_{l} A_{i,l} B_{l,2} \cdots \sum_{l} A_{i,l} B_{l,n}\right] \begin{bmatrix} C_{1,j} \\ C_{2,j} \\ \vdots \\ C_{n,j} \end{bmatrix}$$
$$(ABC)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} C_{k,j} \sum_{l=1}^{n} [A_{i,l} B_{l,k}]$$
$$(ABC)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} B_{l,k} A_{i,l} C_{k,j}$$

On a donc, de manière identique en identifiant les matrices:

$$(CAB)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} A_{l,k} C_{i,l} B_{k,j}$$

De plus:

$$trace(ABC) = \sum_{i=1}^{n} (CAB)_{i,i} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} A_{i,l} C_{k,j} B_{l,k}$$

En effectuant un renommage des indices $(i \to l, l \to k, k \to i)$ on a:

$$trace(ABC) = \sum_{i=1}^{n} (CAB)_{i,i} = \sum_{l=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} A_{l,k}C_{i,l}B_{k,j}$$

C'est à dire:

$$trace(ABC) = trace(CAB)$$

2.3 Préservation du centrage par changement de bases

QUESTION : Montrer que le centrage est préservé par la projection, c'est-à-dire que la projection X_cB d'un nuage de points X_c centré sur une base B est centrée.

Montrons que X_cB est centré c'est à dire :

$$\forall j \in [1, n], \ \sum_{i=1}^{m} (X_c B)_{i,j} = 0$$

On a:

$$\sum_{i=0}^{m} (X_c B)_i = \sum_{i=0}^{m} \left[\sum_{l} (X_c)_{i,l} B_{l,1} \sum_{l} (X_c)_{i,l} B_{l,2} \cdots \sum_{l} (X_c)_{i,l} B_{l,n} \right]$$

$$\sum_{i=0}^{m} \underbrace{(X_c B)}_i = \left[\sum_{i=0}^{m} \sum_{l} (X_c)_{i,l} B_{l,1} \sum_{i=0}^{m} \sum_{l} (X_c)_{i,l} B_{l,2} \cdots \sum_{i=0}^{m} \sum_{l} (X_c)_{i,l} B_{l,n} \right]$$

Or X_c est centré, on a donc:

$$\forall j \in [1, n], \ \sum_{i=1}^{m} (X_c)_{i,j} = 0$$

Ainsi:

$$\sum_{i=0}^{m} \underline{(X_c B)}_i = \left[\sum_{i=0}^{m} 0 \ B_{l,1} \ \sum_{i=0}^{m} 0 \ B_{l,2} \cdots \ \sum_{i=0}^{m} 0 \ B_{l,n} \right] = \mathbf{0}^{\top}$$

C'est à dire X_cB est centré.

2.4 Préservation de l'inertie du nuage de points par changement de bases orthonormées

QUESTION : Montrer que l'inertie totale des points représentés dans la base B est constante, quelle que soit la base orthonormée B considérée.

Soit B_1 et B_2 deux bases orthonormées. Soit x et y deux vecteur exprimés dans B_1 . On peut représenter x et y dans B_2 comme $B_2^{\top}x$ et $B_2^{\top}y$.

On peut facilement montrer que le changements de bases préserve les distances ; on a:

$$d(B_2^\top x, B_2^\top y) = (B_2^\top x)^\top B_2^\top y = x^\top B_2 B_2^\top y = x^\top I_n y = x^\top y = d(x, y)$$

Soit g le centre de gravité de exprimé dans la base B_1 ; $B_2^\top g$ est sa représentation dans B_2 . On a ainsi:

$$\sum_{i=1}^{n} d^2(x_i, g) = \sum_{i=1}^{n} d^2(B_2^{\top} x_i, B_2^{\top} g)$$

C'est à dire que l'inertie est constante quelque soit les bases orthonormées considérées.