Analyse en Composantes Principales

Pascal Romon

ESIPE imac ingénieur

UNIVERSITÉ PARIS-EST MARNE-LA-VALLÉE

Analyse en Composantes Principales (ACP)

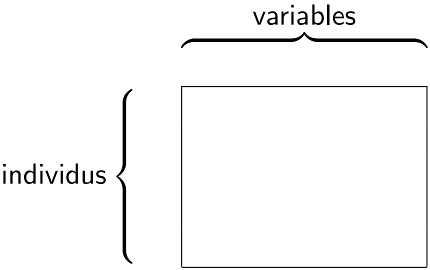
Introduction :
Méthode qui permet d'identifier les corrélations entre des variables, de distinguer les variables corrélées de celles qui ne le sont pas, et de tronquer intelligemment les données et négligeant celles qui comptent le moins.

Idée : les composantes principales correspondent aux vecteurs propres de matrices.

En anglais : Principal Component Analysis (PCA)

Analyse en Composantes Principales (ACP)

Plus précisément :
L'ACP traite un tableau d'individus $\times$ variables.



Exemples

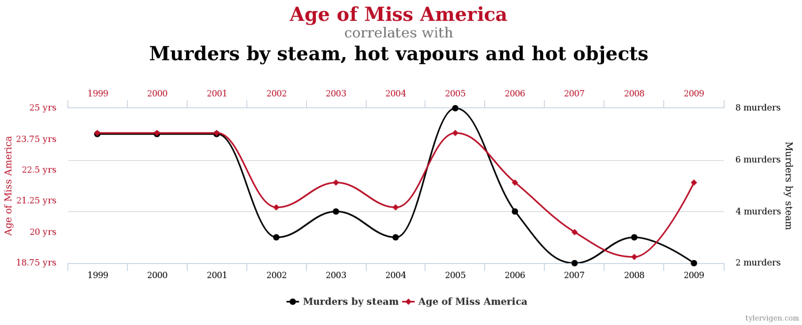
individus	vins	notes examen	personne
variables	fruité	qté de travail	années d'études
	charpenté	pointure	expérience pro
	capiteux	aime chocolat	homme / femme
	gouleyant		salaire

Les enjeux :

- évaluer les ressemblances entre **individus**.
- résumer l'ensemble des **variables** par un petit nombre de variables synthétiques (les composantes principales) représentant un groupe de variables liées entres elles.
- trier les composantes principales par ordre d'impact.
  $\rightarrow$ permet d'éliminer les variables non pertinentes.

Limitations

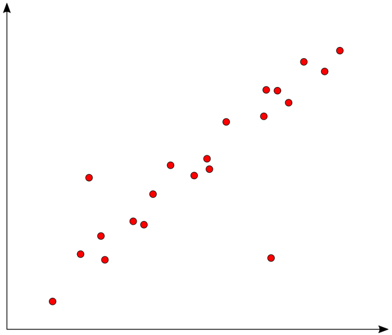
Âge de Miss America
corrélé avec
Meurtres par vapeurs et objets chauds



spurious correlations : http://tylervigen.com/

Une corrélation n'implique pas de relation de cause à effet.

Exemple 2D



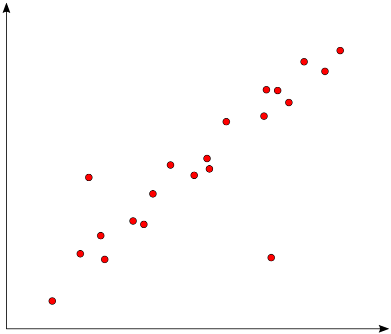
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 12 & 14 \\ 5 & 8 \\ 8 & 7 \\ 20 & 11 \\ \cdots & \cdots \\ 14 & 16 \\ 7 & 10 \\ 22 & 15 \end{bmatrix}$$

individus = points

2 variables = 2 coordonnées

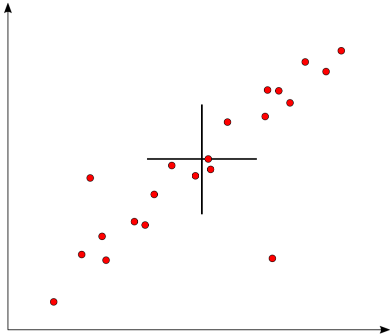
On devine une corrélation : les variables x, y sont du même ordre de grandeur

Centrer les données



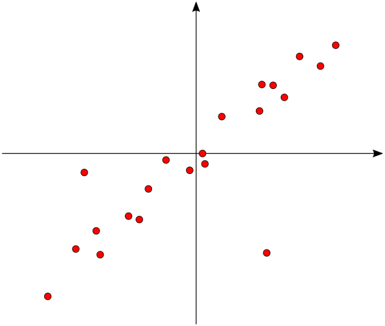
données de départ

Centrer les données



calcul des moyennes $\langle \mathbf{A}_{i\bullet} \rangle$ pour chaque variable i

Centrer les données



centrer les données : $\hat{\mathbf{A}}_{ij} \leftarrow \mathbf{A}_{ij} - \langle \mathbf{A}_{i\bullet} \rangle$

Covariance

Définition : $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \langle \mathbf{x} \rangle)(y_i - \langle \mathbf{y} \rangle)}{n} = \frac{\hat{\mathbf{x}}^\top \hat{\mathbf{y}}}{n}$

Corrélation entre 2 axes :

- $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) > 0$: les 2 dimensions varient conformément
- $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) < 0$: les 2 dimensions varient de façon contraire
- $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$: les 2 dimensions sont indépendantes

Notes :

- $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \text{Cov}(\mathbf{y}, \mathbf{x})$
- $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) =$ variance de $\mathbf{x}$

Matrice de covariance

Qui varie avec qui ?

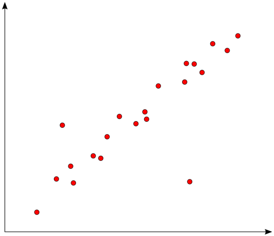
$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{x}) & \mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) & \mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{z}) \\ \bullet & \mathsf{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{y}) & \mathsf{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{z}) \\ \bullet & \bullet & \mathsf{Cov}(\mathbf{z},\mathbf{z}) \end{bmatrix}$$

Pour nos données : $\mathbf{C} = \dfrac{\mathbf{A}_{mn}^{\top}\mathbf{A}_{nm}}{n}$

(désormais nous supposons que les lignes de $\mathbf{A}$ sont centrées).

Note : La matrice $\mathbf{C}$ est symétrique.

Matrice de covariance



$$\mathbf{A} = \left.\begin{bmatrix} 12 & 14 \\ 5 & 8 \\ 8 & 7 \\ 20 & 11 \\ \ldots & \ldots \\ 14 & 16 \\ 7 & 10 \\ 22 & 15 \end{bmatrix}\quad\right\} n$$

$$\mathbf{C} = \frac{\mathbf{A}^\top \mathbf{A}}{n} = \begin{bmatrix} 0.6165 & 0.6154 \\ 0.6154 & 0.7165 \end{bmatrix}$$

Vecteurs propres et valeurs propres

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0.6165 & 0.6154 \\ 0.6154 & 0.7165 \end{bmatrix}$$

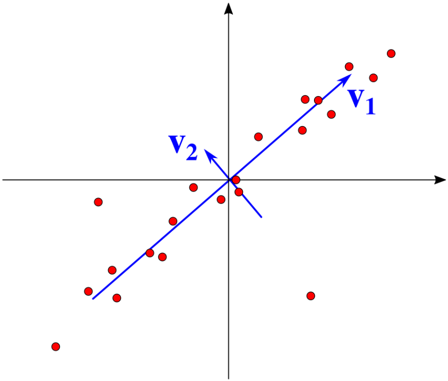
Méthode :
Quels sont les "axes forts" de cette matrice?
$\rightarrow$ vecteurs propres et valeurs propres.

Vecteurs propres et valeurs propres :

$$\begin{array}{ll} \lambda_1 = 1.2844 & \mathbf{v}_1 = (-0.678, -0.735)^\top \\ \lambda_2 = 0.049 & \mathbf{v}_2 = (-0.735, 0.678)^\top \end{array}$$

vecteurs normés et orthogonaux entre eux.

Vecteurs propres et valeurs propres



$\lambda_1 = 1.2844$ $\mathbf{v}_1 = (-0.678, -0.735)$

$\lambda_2 = 0.049$ $\mathbf{v}_2 = (-0.735, 0.678)$

Vecteurs propres et valeurs propres

Un nouvel espace : $\mathbf{C} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^\top$

Vecteurs propres :

$$\mathbf{P}^\top = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \end{bmatrix}$$

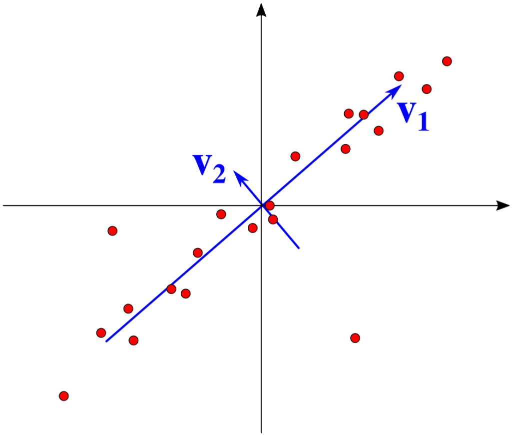
les vecteurs sont triés par valeur propres décroissante.

La transformation pour aller dans cet espace :

$$\mathbf{A}'^\top = \mathbf{P}^\top \mathbf{A}^\top \qquad \mathbf{x}' = \mathbf{P}^\top \mathbf{x}$$

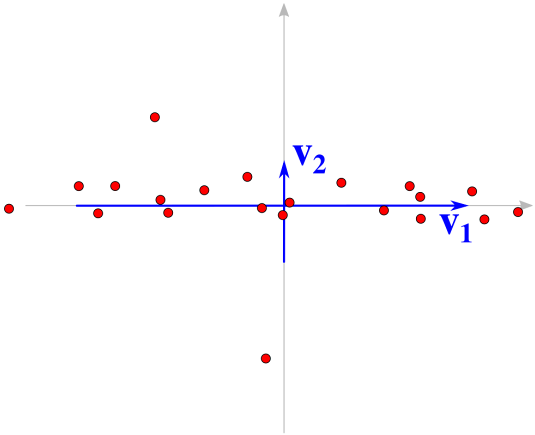
Note : $\mathbf{P}^\top$ est une matrice orthogonale.

Transformation



$$\mathbf{A}'^{\top} = \mathbf{P}^{\top}\mathbf{A}^{\top}$$

Transformation



$$\mathbf{A}'^{\top} = \mathbf{P}^{\top}\mathbf{A}^{\top}$$

Transformation

Pour chaque donnée :

$$\mathbf{x}' = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \end{bmatrix} \mathbf{x}$$

soit

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données

Réduction de $\mathbf{P}^\top$:
On peut supprimer les vecteurs propres associés aux valeurs propres les plus faibles. On ne garde que les composantes principales représentant les variables les plus corrélées (les plus représentatives) parmi les données.

$$\mathbf{P}^\top = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \mathbf{P'}^\top = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Simplification des données

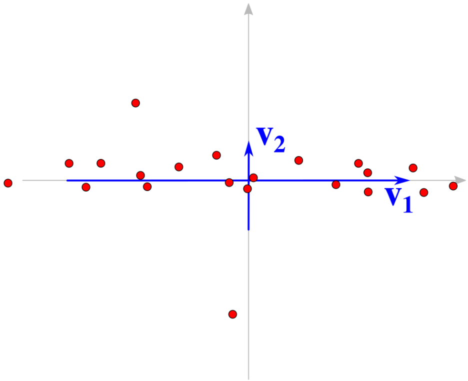
Projection :

$$\mathbf{x}' = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{0}^\top \end{bmatrix} \mathbf{x}$$

soit

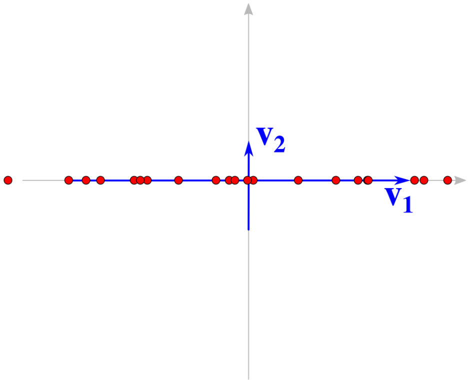
$$\begin{pmatrix} x' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données



$$\begin{pmatrix} x' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données



$$\begin{pmatrix} x' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données

Projection :

$$\mathbf{x}' = \mathbf{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

- $\rightarrow$ on ne garde dans $\mathbf{x}'$ que les k premières composantes, celles qui ont vraiment une signification.
- $\rightarrow$ chacune de ces composantes regroupe un ensemble de variables corrélées.

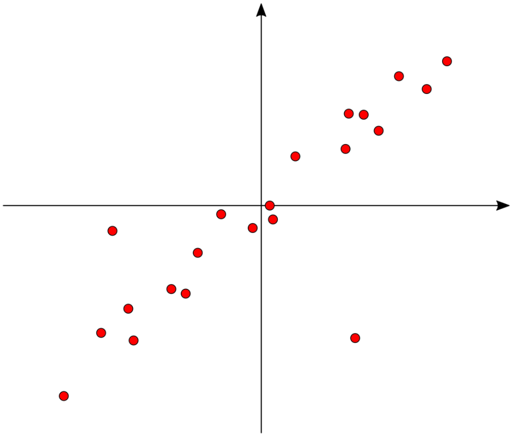
Simplification des données

Reprojection :
la transformation

$$\mathbf{x}' = \mathbf{P}\mathbf{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

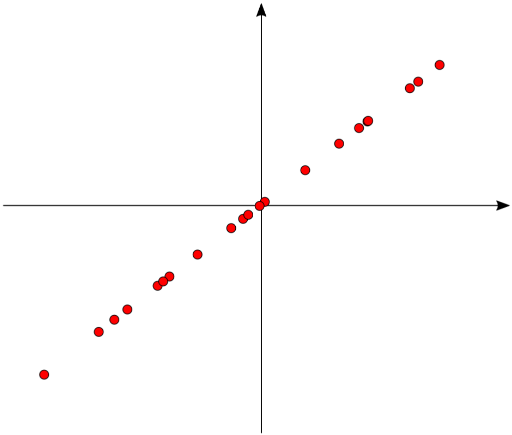
renvoie le vecteur $\mathbf{x}$ dans son espace d'origine en incluant la simplification.

Simplification des données



$$\mathbf{x}' = \mathbf{P}\mathbf{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

Simplification des données



$$\mathbf{x}' = \mathbf{P}\mathbf{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

Vecteurs propres et valeurs propres

Matrice des vecteurs propres :

$$\mathbf{P}^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^\top \end{bmatrix}$$

les vecteurs sont triés par valeur propres décroissante.

Vecteurs propres et valeurs propres

Un nouvel espace : $\mathbf{C} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{\top}$

Pour aller dans cet espace : $\mathbf{A}'^{\top} = \mathbf{P}^{\top}\mathbf{A}^{\top}$

Plus généralement pour un individu $\mathbf{x}$: $\mathbf{x}' = \mathbf{P}^{\top}\mathbf{x}$

où $\mathbf{x}'$ est la représentation de $\mathbf{x}$ dans un espace plus pertinent.

Simplification des données

Réduction de $\mathbf{P}^\top$:

$$\mathbf{P}^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \\ \mathbf{v}_{i+1} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^\top \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \mathbf{P'}^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \\ \hline \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

Simplification des données

Réduction de $\mathbf{P}^\top$:

$$\mathbf{P'}^\top = \left[\begin{array}{c} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \\ \hline \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{array}\right] \quad \rightarrow \quad \mathbf{P'}^\top = \left[\begin{array}{c} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \end{array}\right]$$

Simplification des données

Réduction de $\mathbf{P}^\top$:

$$\mathbf{P}^\top = \begin{bmatrix} 0.45 & 0.18 & -0.59 & -0.64 & 0.11 \\ 0.15 & 0.48 & 0.14 & -0.037 & -0.85 \\ 0.35 & -0.79 & -0.22 & 0.15 & -0.43 \\ 0.7 & -0.02 & 0.67 & -0.089 & 0.23 \\ 0.41 & 0.33 & -0.37 & 0.75 & 0.17 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}'^\top = \begin{bmatrix} 0.45 & 0.18 & -0.59 & -0.64 & 0.11 \\ 0.15 & 0.48 & 0.14 & -0.037 & -0.85 \\ 0.35 & -0.79 & -0.22 & 0.15 & -0.43 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

v1 =

Simplification des données

Projection :

$$\mathbf{x}' = \mathbf{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

où $\mathbf{x}'$ a une dimension inférieure à celle de $\mathbf{x}$.

- $\rightarrow$ on ne garde dans $\mathbf{x}'$ que les k premières composantes, celles qui ont vraiment une signification.
- $\rightarrow$ chacune de ces composantes regroupe un ensemble de variables corrélées.

Super résumé

Résumé :

- centrer les données avec un vecteur $\langle \mathbf{A}_{i,\bullet} \rangle$
- éventuellement normer les données avec un vecteur $\dfrac{1}{\sigma(\mathbf{A}_{i,\bullet})}$
- matrice de covariance $\mathbf{C}$
- vecteurs propres / valeurs propres de $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{P}^\top$
- choisir la dimension du sous espace : $\mathbf{P'}^\top$
- projeter des données : $\mathbf{x}' = \mathbf{P'}^\top \frac{\mathbf{x} - \langle \mathbf{A}_{i,\bullet} \rangle}{\sigma(\mathbf{A}_{i,\bullet})}$
- (optionnel) reprojection : $\mathbf{x}'' = \mathbf{P}\mathbf{P'}^\top \mathbf{x}$

Exemple des salaires I

1. Soustraction des moyennes par colonnes

	années	H/F	salaire
	1	0	1000
	3	0	3000
	5	0	5000
	1	1	1000
	3	1	3000
	5	1	5000
moyenne	3	0.5	3000

années	H/F	salaire
-2	-0.5	-2000
0	-0.5	0
2	-0.5	2000
-2	0.5	-2000
0	0.5	0
2	0.5	2000
0	0	0

Exemple des salaires I

2. Division des colonnes par leur norme (aka écart-type)

	années	H/F	salaire
	-2	-0.5	-2000
	0	-0.5	0
	2	-0.5	2000
	-2	0.5	-2000
	0	0.5	0
	2	0.5	2000
écart-type	4	0.87	4000

années	H/F	salaire
-0.5	-0.41	-0.5
0	-0.41	0
0.5	-0.41	0.5
-0.5	0.41	-0.5
0	0.41	0
0.5	0.41	0.5
1	1	1

Exemple des salaires I

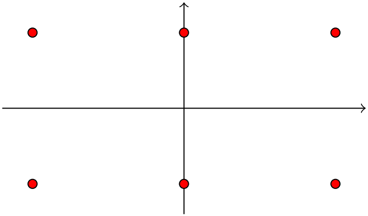
3. Matrice de covariance

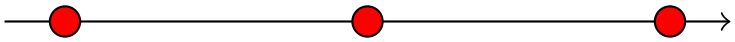
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -0.5 & -0.41 & -0.5 \\ 0 & -0.41 & 0 \\ 0.5 & -0.41 & 0.5 \\ -0.5 & 0.41 & -0.5 \\ 0 & 0.41 & 0 \\ 0.5 & 0.41 & 0.5 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{C} = \frac{1}{6}\mathbf{A}^\top\mathbf{A} = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Exemple des salaires I

4. Diagonalisation

$$\mathbf{D} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$





Exemple des salaires II

1. Soustraction des moyennes par colonnes

	années	H/F	salaire
	1	0	1500
	3	0	4500
	5	0	7500
	1	1	1000
	3	1	3000
	5	1	5000
moyenne	3	0.5	3750

années	H/F	salaire
-2	-0.5	-2250
0	-0.5	750
2	-0.5	3750
-2	0.5	-2700
0	0.5	-750
2	0.5	1250
0	0	0

Exemple des salaires II

2. Division des colonnes par leur norme (aka écart-type)

	années	H/F	salaire
	-2	-0.5	-2250
	0	-0.5	750
	2	-0.5	3750
	-2	0.5	-2700
	0	0.5	-750
	2	0.5	1250
écart-type	4	0.87	5420

années	H/F	salaire
-0.5	-0.41	-0.42
0	-0.41	0.14
0.5	-0.41	0.69
-0.5	0.41	-0.51
0	0.41	-0.14
0.5	0.41	0.23
1	1	1

Exemple des salaires II

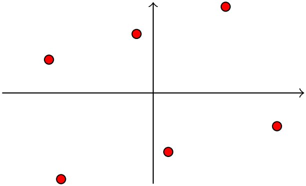
3. Matrice de covariance

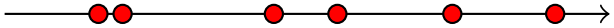
$$\mathbf{C} = \frac{1}{6}\mathbf{A}^\top\mathbf{A} = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0.92 \\ 0 & 1 & -0.34 \\ 0.92 & -0.34 & 1 \end{bmatrix}$$

Exemple des salaires II

4. Diagonalisation

$$\mathbf{D} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1.98 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0.02 \end{bmatrix} \quad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0.66 & 0.35 & 0.66 \\ -0.24 & 0.94 & -0.24 \\ 0.71 & 0 & -0.71 \end{bmatrix}$$





Applications

Applications :

- détection de visages
- statistiques
- traitement d'image
- ...