

Analyse des données

Chapitre 1

Introduction Générale

Chapitre 2

Analyse en Composantes Principales

L’analyse en composantes principales (ACP) est l’une des premières méthodes factorielles d’analyse multidimensionnelle.

1. Données à analyser

L’ACP s’applique sur des données de type quantitatif. Ces données se présentent dans une matrice X de taille (m, n) . n représente le nombre de variables observées sur les m individus.

$$X = \begin{pmatrix} x_1^1 & \cdots & x_1^j & \cdots & x_1^n \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_i^1 & \cdots & x_i^j & \cdots & x_i^n \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ x_m^1 & \cdots & x_m^j & \cdots & x_m^n \end{pmatrix}$$

\longleftrightarrow
 n variables

m individus

Ainsi,

les variables notées X^1, X^2, \dots, X^n se présentent par des vecteurs de \mathbb{R}^m c’est à dire

$$X^j = {}^t(x_1^j, x_2^j, \dots, x_m^j) \in \mathbb{R}^m \text{ pour } j = 1, 2, \dots, n, \text{ et}$$

les individus notés X_1, X_2, \dots, X_m sont des vecteurs de \mathbb{R}^n c'est-à-dire

$$X_i = (x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^n) \in \mathbb{R}^n \text{ pour } i = 1, 2, \dots, m.$$

Exemple Considérons la matrice des notes attribuées à 5 étudiants dans 4 modules.

<i>Etudiants</i>	<i>Modules</i>	Maths	Algorithmique	Base de Données	Géni Logiciel
E_1		7	7	11	12
E_2		9	11	10	9
E_3		5	7	13	11
E_4		11	12	14	13
E_5		15.5	16	16	13

Analyse en composantes principales

Chaque x_i^j représente une donnée c'est-à-dire une information.

x_i^j = la note obtenue par l'étudiant E_i dans le module j pour $i = 1, 2, \dots, 5$ et $j = 1, 2, 3, 4$.

But

Il s'agit d'étudier la variabilité observée sur les individus ou bien sur les variables.

La représentation matricielle des données dans une matrice nous permet de définir deux nuages de points selon les lignes de la matrice ou bien ses colonnes :

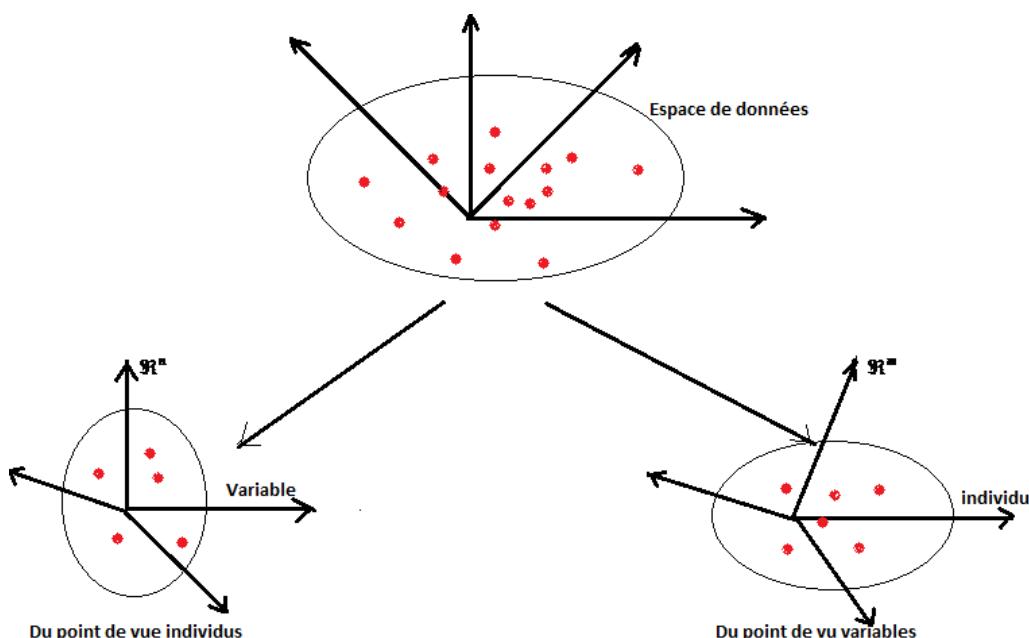


Figure 1. Nuages des données.

i) **Nuage des individus** C'est l'espace des points représentant les individus et chaque axe représente une variable.

ii) **Nuage des variables** C'est l'espace des points représentant les variables. Chaque axe représente un individu.

2. Objectifs

Les objectifs principaux de l'analyse en composantes principales sont :

1. **Décrire** et **analyser** la matrice des données selon ses lignes c'est-à-dire individus ou bien ses colonnes c'est-à-dire ses variables. Ceci dit bien-sur après avoir réduit le nuage des points.
2. **Réduire la dimension** de l'espace initial dans le but de **visualiser** et de **représenter** graphiquement les données. Pour ce faire, nous cherchons le **meilleur sous-espace** qui **approche au mieux** la matrice des données.

Remarque

A chaque individu X_i un poids positif w_i lui est affecté tel que : $\sum_{i=1}^m w_i = 1$.

Dans la pratique, le même poids est associé à tous les individus, il est égal à $1/m$.

Ce qui nous conduit à définir la matrice des poids définie comme suit :

$D = (d_{ii})_i$ avec $d_{ii} = w_i$ pour tout $i = 1, 2, \dots, m$.

$$D = \begin{pmatrix} w_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & w_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/m & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1/m \end{pmatrix}.$$

3. Caractéristiques Numériques

Dans ce qui suit, nous donnons quelques caractéristiques de base liées à l'étude de l'analyse en composantes principales :

1- Moyenne arithmétique

La moyenne arithmétique $\overline{X^k}$ calculée sur une variable X^k est donnée par :

$$\frac{1}{m} \cdot \sum_{j=1}^m x_j^k \quad \text{ou bien} \quad \sum_{j=1}^m w_j \cdot x_j^k \quad \text{d'une manière générale.}$$

2- Centre de gravité

Le centre de gravité du nuage de points est défini par le vecteur :

$$g = (\overline{X^1}, \overline{X^2}, \dots, \overline{X^j}, \dots, \overline{X^n}) \in \Re^n.$$

Où $\overline{X^j}$ est la moyenne arithmétique de la variable X^j pour $j = 1, 2, \dots, n$.

3- Variance

La variance d'une variable X^k est définie par :

$$Var(X^k) = \frac{1}{m} \cdot \sum_{j=1}^m (x_j^k - \overline{X^k})^2.$$

Ou bien d'une manière plus générale :

$$Var(X^k) = \sum_{j=1}^m w_j \cdot (x_j^k - \overline{X^k})^2.$$

4- Ecart-type

L'écart-type d'une variable X^k n'est que la racine carrée de sa variance :

$$\sigma(X^k) = S_k = \sqrt{Var(X^k)}.$$

5- Inertie

L'inertie d'un nuage de points est la quantité d'informations contenue dans la matrice de données. Elle est donnée par la somme pondérée des variances des n variables :

$$I = \sum_{j=1}^n w_j \cdot Var(X^j).$$

4. Mesures de liaison

Avant de représenter les mesures de liaison qui nous permettent d'étudier les relations entre les variables, nous donnons quelques rappels.

4.1 Rappels

i) Produit scalaire

Soient u et v deux vecteurs quelconques de \mathbb{R}^n , alors leur produit scalaire noté $\langle u, v \rangle$ ou bien $u \cdot v$ est défini par :

$$\langle u, v \rangle = \|u\| \cdot \|v\| \cdot \cos(u, v) = \langle v, u \rangle.$$

Le produit scalaire de u et v peut être défini directement en fonction des coordonnées des vecteurs en question par la relation suivante :

$$\langle u, v \rangle = {}^t u \cdot v = u \cdot {}^t v = \sum_{i=1}^n u_i \cdot v_i.$$

Remarques

- Si : les deux vecteurs sont **orthogonaux**, alors **leur produit scalaire est nul**.
- Si : $\|u\| = \|v\| = 1$, alors : $\langle u, v \rangle = \cos(u, v)$.
- Généralement, le produit scalaire se définit relativement à une matrice comme suit :

$$\langle u, v \rangle_M = {}^t u \cdot M \cdot v.$$

ii) Dérivation matricielle

Dérivée d'une matrice par rapport à une variable

Soit A une matrice de taille (n, p) c'est-à-dire $A = (a_{i,j})_{i,j}$ pour $i = 1, 2, \dots, n$ et $j = 1, 2, \dots, p$, alors : la dérivé de A par rapport à une variable t est définie par :

$$\frac{d A}{d t} = \frac{d(a_{i,j})}{d t} \text{ pour tout } i, j.$$

En posant : $\frac{d(a_{i,j})}{d t} = b_{i,j}$ pour tout i, j , alors : $\frac{d A}{d t} = B$.

Exemple

Soit A une matrice carrée de dimension 3 :

$$A = \begin{pmatrix} t & 1 & -1/t \\ 0 & -2t & t \\ 1 & t^3 & -t \end{pmatrix}.$$

Alors la dérivée de A par rapport à t est donnée par :

$$\frac{d A}{d t} = \begin{pmatrix} dt/dt & d1/dt & d(-1/t)/dt \\ d0/dt & d(-2t)/dt & dt/dt \\ d1/dt & dt^3/dt & d(-t)/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/t^2 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 3t^2 & -1 \end{pmatrix}.$$

Dérivée d'une fonction par rapport à une matrice

Soit f une fonction des éléments de la matrice $A = (a_{i,j})_{i,j}$ pour $i = 1, 2, \dots, n$ et $j = 1, 2, \dots, p$, alors :

$$\frac{\partial f}{\partial A} = \frac{\partial f}{\partial (a_{i,j})} \quad \text{pour tout } i = 1, 2, \dots, n \text{ et } j = 1, 2, \dots, p.$$

Exemples

1) Soient X et Y deux vecteurs de \mathbb{R}^n , et f une fonction réelle définie par :

$$f(X, Y) = \langle X, Y \rangle = {}^t X \cdot Y, \text{ alors :}$$

$$f(X, Y) = \sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i.$$

Par suite,

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right)}{\partial x_i} \quad \text{pour : } i = 1, 2, \dots, n.$$

Ainsi,

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot y_i \right)}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial(x_1 \cdot y_1 + x_2 \cdot y_2 + \dots + x_n \cdot y_n)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial(x_1 \cdot y_1 + x_2 \cdot y_2 + \dots + x_n \cdot y_n)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \frac{\partial(x_1 \cdot y_1 + x_2 \cdot y_2 + \dots + x_n \cdot y_n)}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

Ce qui donne :

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = Y.$$

De même, nous pouvons définir la dérivée de f par rapport au vecteur Y :

$$\frac{\partial f}{\partial Y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = X.$$

2) Soit f une fonction factorielle définie par : $f(X) = Y$ avec X et Y deux vecteurs de \mathbb{R}^n , alors :

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \frac{\partial Y}{\partial X} = \frac{\partial Y}{\partial x_i} \quad \text{pour tout } i = 1, 2, \dots, n.$$

Or pour i fixé,

$$\frac{\partial Y}{\partial x_i} = \frac{\partial y_j}{\partial x_i} \quad \text{pour tout } j = 1, 2, \dots, n.$$

Alors, la dérivée de f par rapport au vecteur X est donnée par :

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \frac{\partial y_n}{\partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial y_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}.$$

3) $\frac{\partial(^t X \cdot M \cdot Y)}{\partial M} = X \cdot ^t Y$

4) $\frac{\partial(^t X \cdot M \cdot X)}{\partial X} = M \cdot X + ^t M \cdot X = (M + ^t M) \cdot X.$

Si : M est une matrice symétrique, alors : $\frac{\partial(^t X \cdot M \cdot X)}{\partial X} = 2M \cdot X.$

5) Soit A une matrice carrée d'ordre n : $A = (a_{ij})_{i,j}$ pour $i, j = 1, 2, \dots, n$, alors :

$$trace(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii}. \text{ En posant : } f(A) = trace(A), \text{ alors :}$$

$$\frac{\partial f}{\partial A} = \frac{\partial f}{\partial (a_{ij})} = \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^n a_{ii} \right)}{\partial (a_{ij})} \quad \text{pour } i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Or, $\frac{\partial \left(\sum_{i=1}^n a_{ii} \right)}{\partial (a_{ij})} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad \text{pour tout } i, j = 1, 2, \dots, n.$

D'où,

$$\frac{\partial f}{\partial A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} = Id.$$

4.2 Mesures de liaison

i) Pour mesurer la proximité entre les individus, nous utilisons en général la distance Euclidienne comme suit,

$$d(X_i, X_j) = \left(\sum_{k=1}^n (x_i^k - x_j^k)^2 \right)^{1/2}.$$

ii) Pour juger de la liaison entre les variables c'est-à-dire pour mesurer la dispersion du nuage de points, nous appliquons les deux mesures suivantes :

- **Covariance** Elle permet de préciser le sens de la liaison entre les variables, elle est définie par :

$$\text{cov}(X, Y) = \frac{1}{m} \cdot \sum_{j=1}^m (x_j - \bar{X}) \cdot (y_j - \bar{Y}),$$

pour X et Y deux variables de \mathbb{R}^m .

Remarque La covariance n'est que $\langle \tilde{X}, \tilde{Y} \rangle_M$ pour \tilde{X} et \tilde{Y} les deux variables centrées de X et Y respectivement et M est la matrice des poids.

- **Coefficient de corrélation** Ce n'est qu'une normalisation de la covariance. Il permet de mesurer l'intensité de la liaison linéaire entre les variables, il est défini par :

$$\rho_{X,Y} = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X \cdot \sigma_Y} = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{var}(X)} \cdot \sqrt{\text{var}(Y)}}.$$

Remarque

Le coefficient de corrélation prend ses valeurs entre -1 et 1. Plus précisément, le coefficient de corrélation mesure le cosinus de l'angle inscrit entre les variables. En effet,

$$\frac{\text{cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{var}(X)} \cdot \sqrt{\text{var}(Y)}} = \frac{\langle \tilde{X}, \tilde{Y} \rangle_M}{\|\tilde{X}\|_M \cdot \|\tilde{Y}\|_M} = \cos(\theta_{\tilde{X}, \tilde{Y}}).$$

D'où,

$$\rho_{X,Y} = \cos(X, Y).$$

Définition

Deux variables sont dites décorrélées si leur coefficient est nul, et elles sont linéairement liées si leur coefficient de corrélation est de module égal à 1.