Fiche RD 1 : SVD

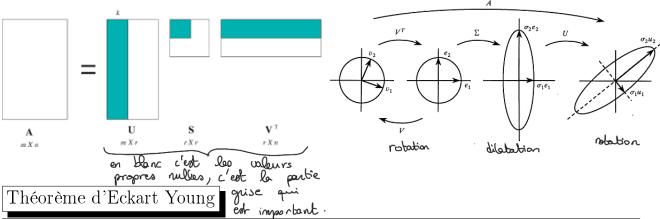
DVS

Soit une matrice réelle $A_{n\times p}$ de rang r. On note A^T sa transposée. On définit :

- $\lambda_1 = s_1^2 \ge \cdots \ge \lambda_r = s_r^2 > 0$ les r valeurs propres **strictement positives** de $A^T A$,
- Σ la matrice diagonale des valeurs singulières de A, $s_1 = \sqrt{\lambda_1} \ge \cdots \ge s_r = \sqrt{\lambda_r} > 0$,
- $V = [v_1, \dots, v_r], v_i \in \mathbb{R}^p$, les r vecteurs propres orthonormés correspondants de $A^T A$,
- $U = [u_1, \dots, u_r], u_i \in \mathbb{R}^n$, les r vecteurs propres orthonormés de $AA^T, U = AV\Sigma^{-1}$,

On a alors la SVD de A:

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{s=1}^r s_s u_s v_s^T$$



Soit une matrice réelle $A_{n \times p}$ de rang r. On a alors :

$$\min_{\text{rang}(M) \le k} ||A - M||_2 = ||A - A_k||_2 = s_{kn}^2 + \dots + s_{\ell}^2 \text{ avec } A_k = s_1 u_1 v_1^T + \dots + s_k u_k v_k^T$$

Applications

- Compression de données (matrices, images...) en prenant A_k au lieu de A,
- Calcul de l'inverse généralisée de Penrose, $A^+ = V \Sigma^{-1} U^T$ avec $AA^+A = A$
- Solution des moindres carrés pour Ax = b avec $x = A^+b$,
- Base de l'analyse factorielle : ACP, AFC ... avec la SVD généralisée

Cacul pratique

- \bullet Calculer A^TA
- Calculer χ_{A^TA} et en déduire s_1^2, \ldots, s_r^2 puis v_1, \ldots, v_r orthonormés,
- en déduire u_1, \ldots, u_r orthonormés par la relation $u_i = \frac{1}{s_i} A v_i \ (U = AV\Sigma^{-1}).$

Fiche RD 2 : Inertie d'un nuage de points

On considère un tableau $X_{n \times p}$ dont les lignes $x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})$ définissent des individus et les colonnes $X^j = (x_{1j}, \dots, x_{nj})$ définissent des variables quantitatives. On note D la matrice diagonales des poids des individus (p_1,\ldots,p_n) en général égale à $\frac{1}{n}I_n$. Ces notions sont indispensables pour comprendre l'ACP et la classification.

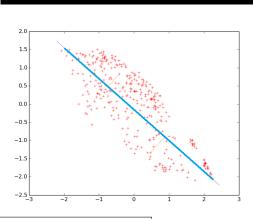
Nuage des individus $\mathcal{N}_{\mathcal{I}} = \{(x_i, p_i), i = 1 \dots n\}$ dans \mathbb{R}^p

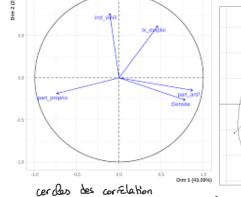
- Le centre de gravité du nuage est $g_I = (\bar{X^1}, \dots, \bar{X^p}) = \mathbb{1}_n^T D X$.
- X est le plus souvent centré, et $X_c = X \mathbb{1}_n g^T$ la matrice centrée. L'inertie totale est $I_T(\mathcal{N}_{\mathcal{I}}) = \sum_{j=1}^p \sigma_j^2 \ (= \sum_{i=1}^p \sigma_j^2 \ (x_i, g_I))$, avec σ_j^2 la variance de X^j .
- $S = X^T D X = \left(cov(X^j, X^{j'})\right)_{i,i'=1\dots p}$ est la matrice de variance-covariance
- Si X est normée, $\sigma_j=1,\,S$ est la matrice des corrélations et $I_T=p$. Variables

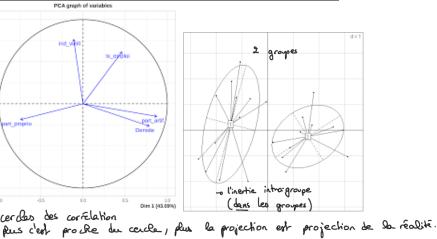
Dans le cas général, le nuage est centré au départ de l'analyse, c'est impératif pour l'étude des

Nuage des variables $\mathcal{N}_{\mathcal{J}} = \{(X_j, 1), j = 1 \dots p\}$ dans \mathbb{R}^n

- Les variables centrées sont représentées par des vecteurs.
- $||X^j|| = \sigma_i$, la norme d'une variable est son écart-type.
- $\cos(X^j, X^{j'}) = \frac{\langle X^j, X^{j'} \rangle}{\|X^j\| \|X^{j'}\|}$ et $\cos(j, j') = \cos(X^j, X^{j'})$.
- Si X est centrée normée, les variables sont des vecteurs de norme 1 (cercle des corrélations) et la corrélation de deux variables est égale à l'affixe de la projection d'une variable sur l'autre.







Propriétés de l'inertie

- Théorème de Huygens : Si le nuage est constitué de sous groupes k de poids $\pi_k, k = 1 \dots q$, alors $I_T(\mathcal{N}) = \sum_{k=1}^q \underbrace{I_T(\mathcal{N}_k)}_{\text{Inertie}} + \sum_{k=1}^q \underbrace{\pi_k \|g_{k^-}g\|^2}_{\text{Inertie}} = I_{intra} + I_{inter}$ • Théorème de Pythagore: Soit E un sous espace de \mathbb{R}^p , alors l'inertie se décompose suivant
- les sous-espace E et E^{\perp} , $I_T = I_E + I_{E^{\perp}}$
- Projection orthogonale: La projection orthogonale d'un point x suivant un axe de vecteur normé u est $\pi_u(x) = \langle u, x \rangle u$ d'affixe $\langle u, x \rangle$ suivant l'axe.

Fiche RD 3 : Analyse factorielle d'un triplet (X, Q, D)

Soit un triplet statistique (X, Q, D), $X_{n \times p}$ contient les données, individus en ligne, $Q_{p \times p}$ définit la métrique pour le calcul de distance entre individus et $D_{n \times n}$ la matrice des poids. L'analyse factorielle consiste à reconstituer le nuage suivant des axes factoriels orthogonaux d'inertie décroissante.

SVD généralisée du triplet (X, Q, D)

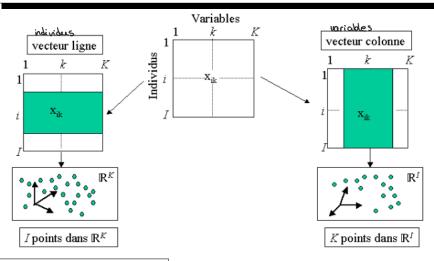
- Soit Σ la matrice diagonale des r valeurs singulières non nulles du triplet (X, Q, D), racines des valeurs propres de $X^T D X Q$, $s_1 \geq ... \geq s_r > 0$,
- $V_{p \times r} = [v_1, ..., v_r]$, la matrice des vecteurs propres Q— orthonormées correspondant de $X^T D X Q = \mathbf{V} \mathbf{\Sigma}^2$ et $\mathbf{V}^T \mathbf{Q} \mathbf{V} = \mathbf{I_r}$,
- $U_{n \times r} = [u_1, ..., u_r]$, la matrice des vecteurs propres D- orthonormées correspondant de XQX^TD $XQX^TDU = U\Sigma^2$ et $U^TDU = I_r$,

On retrouve alors $\mathbf{X} = \mathsf{U} \, \mathbf{\Sigma} \, \mathsf{V}^{\mathbf{T}} = \sum_{i=1}^{\mathbf{r}} \mathbf{s}_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^{\mathbf{T}}$.

• En pratique : Réaliser la SVD simple de $D^{1/2}XQ^{1/2} = U'\Sigma'V'^T$. On a alors $\Sigma = \Sigma'$, $V = Q^{-1/2}V'$ et $U = D^{-1/2}U'$.

Lien entre SVD et ACP

- On définit une nouvelle norme $||X||_{Q,D} = \operatorname{tr}(X^T D X Q)$ égale à l'inertie totale du nuage I_T .
- On a alors $\min_{\text{rang}(X_k) \le k} ||X X_k||_{Q,D} = s_{k_{\mathsf{rf}}}^2 + \dots + s_{\ell}^2$ avec $X_k = s_1 u_1 v_1^T + \dots + s_k u_k v_k^T$.
- Le sous espace de dimension k suivant lequel l'inertie projetée est maximale est $\text{Vect}\{(v_1,\ldots,v_k)\}$.
- On projette ligne et colonne suivant chacun des axes pour obtenir les composantes principales (affixes) ligne et colonne du tableau : $F_L = XQV$, soit $F_s = XQv_s$ et $F^C = X^TDU = V\Sigma$, soit $F^s = s_sv_s$.



Bilan de l'analyse factorielle

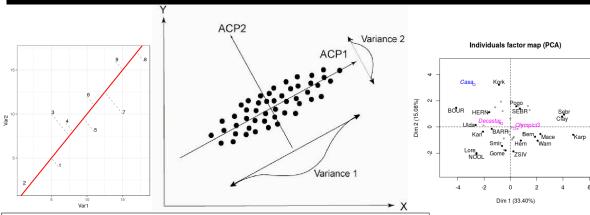
- SVD : V et U vérifient $\mathbf{X^TDXQV} = \mathbf{V\Sigma^2}$ et $\mathbf{V^TQV} = \mathbf{I_r}$ et $\mathbf{XQX^TDU} = \mathbf{U\Sigma^2}$ et $\mathbf{U^TDU} = \mathbf{I_r}$
- Composantes principales $F_L = XQV$ et $F^C = V\Sigma$ (affixe des projections sur les axes factoriels V, U).
- Inertie projetée suivant un axe $s \lambda_s = \S_s^2$, un plan $\lambda_{s,s'} = \S_s^2 + \S_s'^2$.
- Transition entre U et $V: U = XQV\Sigma^{-1}$ $V = X^TDU\Sigma^{-1}$,
- Transition entre F_L et $F^C : \mathbf{F^C} = \mathbf{X^T} \mathbf{DF_L} \mathbf{\Lambda^{-1}}$ et $\mathbf{F_L} = \mathbf{XQF^C} \mathbf{\Lambda^{-1}}$, de plus $F^C = V\Sigma$ et $F_L = U\Sigma$
- Transition entre $F_L(i)$ et $F_C(j)$: $\mathbf{F^s(j)} = \frac{1}{\mathbf{s_s}} \sum_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{n}} \mathbf{F_s(i)}$ et $\mathbf{F_s(i)} = \frac{1}{\mathbf{s_s}} \sum_{\mathbf{j=1}}^{\mathbf{p}} \mathbf{F^s(j)}$

Fiche RD 4: ACP, Analyse en composantes principales

Soit un triplet statistique (X, Q, D). L'analyse en composantes principales classique, normées ou non normées, portent sur un tableau X quantitatif et des métriques $Q = I_p$, $D = \frac{1}{n}I_n$.

Nuage des individus

- Les individus sont représentés par des points $x_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})$ dans \mathbb{R}^p .
- La distance entre points, définie par Q est la distance canonique en ACP normée ou non normée.
- L'ACP détermine des sous espaces dans lesquels la déformation du nuage projeté est minimale par rapport au nuage initial en maximisant l'inertie projetée.
- L'ACP revient à projeter les individus suivant les axes factoriels de la SVD.
- \bullet Les affixes des individus suivant ces axes sont notés F_s et s'appellent les composantes principales.

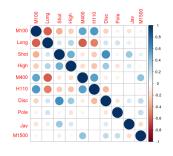


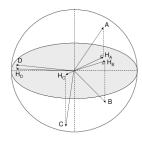
Nuage des variables pour des variables colonnes quantitatives

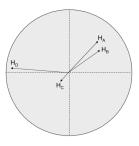
- les colonnes sont associées à des vecteurs $X^j = (x_{1j}, \dots, x_{nj})$ de \mathbb{R}^n .
- La matrice X^TDXQ de la SVD est la matrice de variance covariance $S = \frac{1}{n}X^TX$.
- La norme d'une variable est égale à son écart-type : $||X^j|| = \sigma_j$.
- Le cosinus de l'angle entre deux variables représente la corrélation : $\cos_{jj'} = \cos(X^j, X^{j'})$.
- L'ACP détermine les combinaisons linéaires normées des variables, non corrélées et de variance maximales. On construit de nouvelles variables synthétiques non corrélées}.

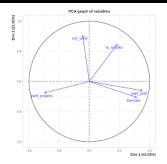
Nuage des variables en ACP normée (variables réduites)

- Chaque variable est associée dans \mathbb{R}^n à un vecteur unitaire, $||X^j|| = \sigma_j = 1$.
- La matrice X^TDXQ de la SVD est la matrice des corrélations $S=\frac{1}{n}X^TX$ avec 1 sur la diagonale.
- Sa projection dans un plan est représentée dans le cercle des corrélations.
- ullet L'inertie totale est le nombre p de variables.







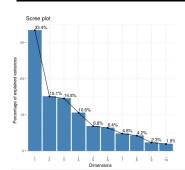


Qualité globale : τ_s , $\tau_{s,s'}$

• La qualité globale d'un axe ou d'un plan factoriel est le % de l'inertie expliquée :

$$\tau_s = \frac{s_s^2}{\sum_{k=1}^p s_k^2} \text{ et } \tau_{s,s'} = \frac{s_s^2 + s_{s'}^2}{\sum_{k=1}^p s_k^2} \text{ avec } s_k \text{ les valeurs singulières.}$$

ullet Choix des axes factoriels retenus : part d'inertie expliquée, méthode de Kaiser $(s_s > 1)$, éboulis,...





Qualité de représentation \cos^2

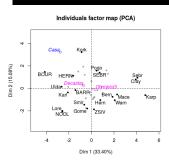
• \cos^2 permet d'évaluer si la projection d'un point dans un plan est une bonne représentation du point d'origine. On peut effacer ou réduire les points mal représentés.

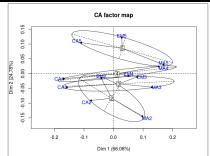
•
$$\cos_s^2(i) = \frac{\text{inertie du projeté de } i \text{ sur} v_s}{\text{inertie de } i} = \frac{F_s^2(i)}{\sum_{k=1}^p F_k^2(i)}$$

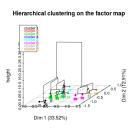
• En ACP normé, une variable proche du cercle est bien représentée

Contribution : contrib

- La contribution d'un point ou d'une variable permet d'évaluer la part d'explication de l'inertie d'un axe s donné $(=s_s^2)$
- $\operatorname{contrib}_s(i) = \frac{\text{inertie du projeté de } i \text{ sur } v_s}{\text{inertie projetée sur } v_s} = \frac{p_i F_s^2(i)}{s_s^2}$
- En ACP normée, $F^s(j) = \cos(X^j, u_s)$ est la corrélation entre la variable et la composante principale, on a alors $\operatorname{contrib}_s(j) = \frac{\cos^2(X^j, u_s)}{s_s^2}$







Individus et variables supplémentaires, variable qualitative

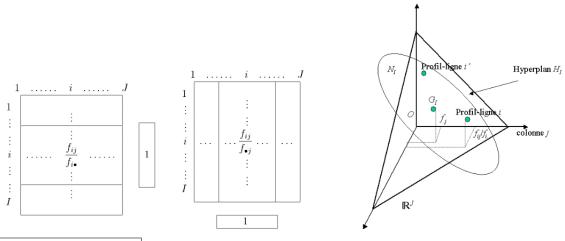
- On peut projeter des individus supplémentaires après construction des axes, les composantes principales sont $X_i^T V$.
- On peut représenter une variable supplémentaire en calculant ses corrélations avec les composantes principales.
- On peut représenter une variable qualitative en indiquant par une couleur ou des ellipses les modalités de cette variable, faire des groupes par classification (CAH, k means)...

Fiche RD 5 : AFC, Analyse factorielle des correspondances

Soit un tableau N de contingence, tableau croisé de deux variables qualitatives, L avec I modalités i en ligne et C avec J modalités j en colonne d'effectif total n. On note $F = \frac{1}{n}N$ les fréquences relatives, $D_I = \operatorname{diag}(f_{i.})$ et $D_J = \operatorname{diag}(f_{.j})$ les matrices diagonales des fréquences marginales F_I et F_J .

Nuage des profils lignes et colonnes

- Les profils lignes (colonnes) sont les distributions conditionnelles à chaque modalité de L (C). On pose $L = D_I^{-1}F = \left(\frac{f_{ij}}{f_{i.}}\right)_{ij}$ et $C = D_J^{-1}F^T = \left(\frac{f_{ji}}{f_{.j}}\right)_{ji}$ dont chaque ligne représente un profil.
- Les profils lignes (colonnes) sont représentés par des points dans un hyperplan de l'espace \mathbb{R}^J (\mathbb{R}^I) car la somme des colonnes vaut 1.
- La distance entre profils lignes (colonne) est définie par $Q_I = D_J^{-1}$ ($Q_J = D_I^{-1}$) appelée distance du $\chi^2: d_{\chi^2}^2(i,i') = \sum_{j=1}^J \frac{1}{f_{i,j}} \left(\frac{f_{i,j}}{f_{i,j}} \frac{f_{i'j}}{f_{i'}}\right)^2$.
- L'AFC consiste en l'analyse conjointe de la double ACP sur chacun des nuages de profils à partir des triplets $(L = D_I^{-1}F, D_J^{-1}, D_I)$ et $(C = D_J^{-1}F^T, D_I^{-1}, D_J)$ pour déterminer les sous espaces maximisant l'inertie projetée.
- ullet Les affixes des profils suivant ces axes sont notés F_L ou F^C et s'appellent les composantes principales.



Spécificités de l'AFC

• L'inertie totale est une grandeur statistique égale à $I_T = \frac{1}{n}D_n^2$

avec $D_n^2 = \sum_{i,j} \frac{\left(n_{ij} - \frac{n_{i,n_{,j}}}{n}\right)^2}{\frac{n_{i,n_{,j}}}{n}}$ la statistique du χ^2 du tableau de contingence.

- Les profils appartiennent à un hyperplan, soit au plus $\min(I-1, J-1)$ axes factoriels.
- Le tableau des profils n'est pas centré et le premier axe factoriel est l'axe reliant O au centre de gravité du nuage, F_J ou F_I , associé à la valeur propre 1, éliminé de l'analyse automatiquement.
- Les valeurs propres sont toutes inférieures à 1.
- Une ou des valeurs propres proches de 1 indiquent des associations quasi exclusives.
- Effet Guttman: Un nuage de points de forme parabolique indique une redondance entre les deux variables étudiées: la connaissance de la ligne i donne pratiquement celle de la colonne j. Dans un tel cas, pratiquement toute l'information est contenue dans le premier facteur. Cette configuration se rencontre notamment lorsque les deux variables sont ordinales, et classent les sujets de la même façon. Dans ce cas, le premier axe oppose les valeurs extrêmes et classe les valeurs, tandis que le deuxième axe oppose les intermédiaires aux extrêmes.

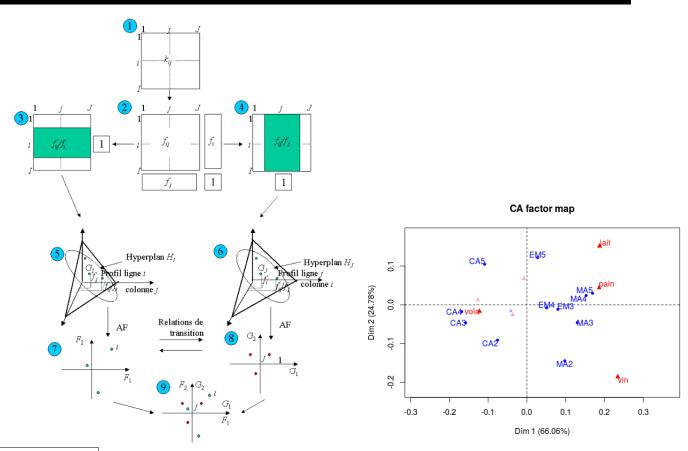
Relations quasibarycentriques et représentation simultanée des deux nuages

• Les formules de transition,

$$F_L^s(i) = \frac{1}{s_s} \sum_{j=1}^J \frac{f_{ij}}{f_{i.}} F_s^C(j) \text{ et } F_s^C(j) = \frac{1}{s_s} \sum_{i=1}^I \frac{f_{ij}}{f_{.j}} F_L^s(i),$$

montre que l'affixe de la projection d'une modalité sur un axe donné est le barycentre des affixes des projections des modalités de l'autre variable à un coefficient près $\frac{1}{s_*}$.

- Ce résultat justifie la représentation simultanée des profils des 2 variables dans un même espace et l'interprétation des distances entre modalités des deux variables (correspondance) :
 - une faible distance indique une plus forte association par rapport à l'indépendance (pain et MA5),
 - une forte distance indique une plus faible association par rapport à l'indépendance (vin et CA5).
- Deux profils d'une même variable sont proches si leurs distributions conditionnelles le sont (CA3 et CA4)



Bilan des ACP

Fiche RD 6: ACM, Analyse factorielle des correspondances multiples

Les données traitées sont le croisement de plusieurs variables qualitatives, par exemple un questionnaire. On distingue

- le tableau codé
- le tableau disjonctif complet $Z=(z_{ij})_{i,j}$ dont les lignes sont les n individus i, et les colonnes les modalités j des q variables k. $z_{ij}=1$ ou 0 suivant que l'individu i possède ou non la modalité i. On note $p=p_1+\cdots+p_q$ le nombre de modalités total avec p_k le nombre de modalités de la variable k.
- le tableau de Burt $B = Z^T Z$ constitué des q^2 tableaux de contingence des variables 2 à 2.

Tableau codé X^1 X^k X^q

Tableau disjonctif \boldsymbol{Z}

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc|ccc|ccc|} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}\right)$$

Tableau de Burt $B = Z^T Z$ $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 2 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 3 & 2 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

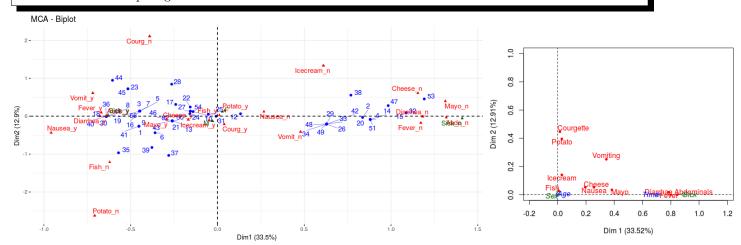
AFC N = Z $n_T = n \times q$ $F = \frac{1}{nq}Z$ $z_i = q$ $D_I = \frac{1}{n}I_n$ $D = \operatorname{diag}(z_{\cdot j})$ $D_J = \frac{1}{n}D$

Nuage des profils lignes et colonnes

- L'ACM consiste à réaliser l'analyse des correspondances du tableau disjonctif complet (ou celui de Burt). On construit alors les profils ligne et colonne correspondant que l'on projette dans l'espace.
- Les *n* profils lignes s'obtiennent pour chaque individu *i* en divisant la ligne par *q*, le nombre de variables.

Les coordonnées sont 1/q si l'individu i possède la modalité j, 0 sinon.

- La distance du χ^2 entre deux individus est
 - faible si les individus ont beaucoup de modalités communes,
 - d'autant plus grandes s'ils ont des modalités différentes peu fréquentes.
- Les p profils colonnes s'obtiennent pour chaque modalité j en divisant par l'effectif total de la modalité j, $z_{.j}$. Les coordonnées sont $1/z_{.j}$ si l'individu possède la modalité j, 0 sinon.
- La distance du χ^2 entre deux modalités de variables différentes est
 - faible si les individus possèdent le plus souvent simultanément les 2 modalités,
 - d'autant plus grandes si on les rencontre peu simultanément.
- La distance du χ^2 entre deux modalités d'une même variable est
 - faible si les individus possédant l'une ou l'autre des 2 modalités ont les autres variables similaires,
 - d'autant plus grandes si ils ont les autres variables différentes.



Spécificités de l'ACM

- ACP des individus. L'ACM permet contrairement à l'AFC de visualiser le nuage des individus. Elle permet aussi de construire à partir de variables qualitatives des variables quantitatives pour les individus à travers les composantes principales obtenues (pour la classification, la régression...)
- AFC des modalités et des variables. Comme pour l'AFC, la représentation des modalités permet de mettre en évidence des correspondances entre modalités des différentes variables. Leur contribution et la valeur test permettent d'évaluer leur pertinence.
- Inertie. L'inertie d'une ACM est en partie "artificielle". L'inertie est :

Par modalité,
$$I(j) = \frac{1}{q}(1 - \frac{z_{.j}}{n})$$
; par variable, $I(X^k) = \frac{p_k}{q} - \frac{1}{q}$; au total, $I_T = \frac{p}{q} - 1$.

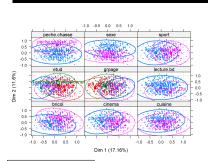
Une modalité rare $(z_{.j} \approx 0 \text{ et } I(j) = \frac{1}{q})$ a un poids très important, à éviter en la regroupant à une autre modalité.

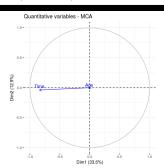
Une variable ayant de nombreuses modalités, $p_k >> 1$, a un poids important, à éviter en regroupant les modalités.

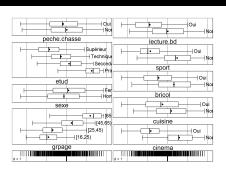
• Choix des axes. Il y a au plus p-q-1 axes factoriels. Pour la sélection des axes, Benzecri a proposé de recalculer les valeurs propres :

Pour $\lambda > \frac{1}{q}$, q le nombre de variables, on remplace la valeur propre par $(\frac{q}{q-1})^2(\lambda - \frac{1}{q})^2$, 0 sinon Les inerties comme les \cos^2 sont à interpréter avec précaution («1 artificiellement).

- Regroupement par variable. Le nuage des modalités d'une variable est centré. Il est possible de visualiser la corrélation de la variable avec l'axe, $\eta^2(s,k) = \frac{\mathrm{Var}(E(F_L^s|j))}{\mathrm{Var}(F_L^s)} = \sum_{j \in I(k)} \frac{z_{.j}}{n} (F_s^C(j))^2 = q \sum_{j \in I(k)}$ inertie de j sur s, et de réaliser un pseudo test pour un axe donné. On peut représenter la répartition de la composantes principale en fonction des modalités d'une variable donnée pour visualiser cette corrélation.
- Variables quantitatives. On peut utiliser une variable quantitative dans l'analyse en la transformant eau préalable en classe (discrétisation)
- Variable quantitative en supplémentaire. On étudie les corrélations de cette variable avec les composantes principales des individus (cercle des corrélations).
- Variable qualitative en supplémentaire. On peut tester pour chaque variable sa signification par rapport à un axe à l'aide d'un test (ANOVA) et de même pour chaque modalité (| valeur test |>2).







Bilan ACM

	ligne	colonne
Triplet	$\left(\frac{1}{q}Z, nqD^{-1}, \frac{1}{n}I_n\right)$	$\left(D^{-1}Z^T, nI_n, \frac{1}{nq}D\right)$
X^TDXQ	Z^TZD^{-1}	$ZD^{-1}Z^T$
Axes factoriels V	$Z^T Z D^{-1} V_L = V_L \Sigma^2$	$ZD^{-1}Z^TV^C = V^C\Sigma^2$
Normalisation	$nqV_L^T D^{-1} V_L = I_r$	$nV_C^T V_C = I_r$
Composantes principales	$F_L = nZD^{-1}V_L$	$nD^{-1}Z^TV^C$
Transitions	$F_L = \frac{1}{q} Z F^C \Sigma^{-1}$	$F^C = D^{-1}Z^T F_L \Sigma^{-1}$