Analyse en composantes principales

Christophe Ambroise

Section 1

Introduction

Introduction I

Objectif

Les *méthodes factorielles* ont pour objectif de

- visualiser, et plus généralement,
- traiter des données multidimensionnelles,

Redondance

La prise en compte simultanée de nombreuses variables est un problème difficile ;
Heureusement, l'information apportée par ces variables est souvent redondante

Une solution

Remplacer les variables initiales par un nombre réduit de nouvelles variables sans perdre trop d'information.

Introduction II

Principes

Par exemple, lorsque les variables sont toutes quantitatives, l'analyse en composantes principales (ACP) va chercher à résoudre ce problème en

- considérant que les nouvelles variables sont des combinaisons linéaires des variables initiales
- non corrélées

Tableau original vers tableau synthétique

On passe d'un tableau original X à un tableau synthétique avec le même nombre de lignes mais un nombre de colonnes réduit C.

Historique

Cette méthode a d'abord été développée par K.Pearson (1900) pour deux variables, puis par H. Hotelling (1933) qui l'a étendue à un nombre quelconque de variables.

Maximisation de la variance des données projetées I

Le nuage des individus

Le tableau de données X est une $n \times p$ matrice réelle:

- chaque lignes X_i décrit un individu par p variables
- chaque colonne X^j décrit une variable par n individus

Centrage de la matrice X

Le nuage des individus est centré autour du centre de gravité du nuage (ou vecteur des moyennes empiriques):

$$\bar{X} = \frac{1}{n} X_i = \begin{pmatrix} X_{i1} \\ X_{i2} \\ \dots \\ X_{ip} \end{pmatrix}$$

Sans perte de généralité nous supposerons que ce vecteur moyenne est le vecteur nul (il suffit de centrer la matrice X originale).

Maximisation de la variance des données projetées II

Variance empirique

La variance empirique du nuage est la somme des variance de chaque variable:

$$\hat{\sigma}^2 = \sum_{j=1}^{p} \hat{\sigma}_j^2$$

avec $\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{n} \sum_i X_{ij}^2$

Lien entre variance empirique et inertie

$$n\hat{\sigma}^2 = \sum_i \sum_{j=1}^{p} X_{ij}^2$$

peut s'interpréter aussi comme la somme des distances des individus au centre du nuage.

Projection des individus I

Projection sur l'axe $\boldsymbol{u}_1$

La projection vectorielle du vecteur X_i sur la droite vectorielle de vecteur directeur $\boldsymbol{u}_1$ est défini par

$$c_{i1}\boldsymbol{u}_1$$

où $c_{i1} =< X_i, \boldsymbol{u}_1 >$ est la coordonnée de X_i dans la base $\{\boldsymbol{u}_1\}$.

Projection sur le sous espace vectoriel de base $\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_d$

La projection vectorielle du vecteur X_i sur le s.e.v. de base $\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_d$ est défini par le vecteur

$$c_{i1}\boldsymbol{u}_1 + ... + c_{id}\boldsymbol{u}_d$$

où $c_{ik} =< X_i, \boldsymbol{u}_k >$ est la $k$ième coordonnées de X_i dans base.

Matrice de variance covariance empirique et diagonalisation I

La matrice $S = \frac{1}{n} X^t X$ est une estimation de la matrice de variance. C'est une matrice symétrique définie positive. En effet, $S = S^t$ et

$$\boldsymbol{y}^t S \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^t \frac{1}{n} \sum_i X_i X_i^t \boldsymbol{y} \tag{1}$$

$$= \frac{1}{n} \sum_i (\boldsymbol{y}^t X_i)(X_i^t \boldsymbol{y}) \qquad = \sum_i \|\boldsymbol{y}^t X_i\|^2 \geq 0 \tag{2}$$

Interprétation

- les termes de la diagonale sont les variances empiriques:

$$\hat{\sigma}_j^2 = \frac{1}{n} \sum_i X_{ij}^2$$

- les termes hors diagonales sont les covariances empiriques

$$\hat{\rho}_{jk}^2 = \frac{1}{n} \sum_i X_{ij} X_{ik}$$

Variance projetée sur un axe I

On cherche à trouver $\boldsymbol{v}$ tel que la projection des individus de X sur le vecteur $\boldsymbol{v}$ (projection vectorielle) soit maximum:

$$\begin{cases} \max_{\boldsymbol{v}} \boldsymbol{v}^t S \boldsymbol{v}, \\ \boldsymbol{v}^t \boldsymbol{v} = 1. \end{cases}$$

avec $S = \frac{1}{n} X^t X$

Si l'on exprime $\boldsymbol{v}$ dans la base (orthonormée) des vecteurs propres de S,

$$\boldsymbol{v} = \sum_{j=1}^{p} \alpha_j \boldsymbol{u}_j$$

alors le problème précédent devient

$$\begin{cases} \max_{\alpha_1,\ldots,\alpha_d} (\sum_{j=1}^{p} \alpha_j \boldsymbol{u}_j)^t U D U^t (\sum_{j=1}^{p} \alpha_j \boldsymbol{u}_j), \\ \sum_j \alpha_j^2 = 1. \end{cases}$$

Variance projetée sur un axe II

$$\begin{cases} \max_{\alpha_1,\ldots,\alpha_d}(\sum_{j=1}^{p} \alpha_j^2 \lambda_j), \\ \sum_j \alpha_j^2 = 1. \end{cases}$$

où λ_j est la jème valeur propre.

Solution

L'équation donne donc un barycentre sur la demi droite des réels positifs entre λ_1 et λ_p. La valeur max du barycentre estλ_1, et elle est obtenue pour $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_j = 0, \forall j \neq 1$ (car tous les λ_j sont positifs). Le vecteur solution est donc le vecteur propre de S associé à la plus grand valeur propre λ_1. La projection des X_i sur $\boldsymbol{u}_1$ est la première composante principale

$$C^1 = (c_{11}, ..., c_{n1})^t$$

Variance projetée sur un sous espace vectorielle

On admettra que le sous espace vectoriel de dimension k qui maximise la variance projetée est le sous espace vectoriel engendré par les k premiers vecteur propres de S.

Composantes principales

Les projections des X_i sur les vecteurs propres $\boldsymbol{u}_j$ sont les composantes principales:

$$C = \left(C^1 ... C^p\right) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \dots & c_{np} \end{pmatrix}$$

Relation entre données originales et composantes principales

$$C = XU$$

Formule de reconstitution

$$X = \sum_j C^j \boldsymbol{u}_j^t$$

La dernière relation montre que l'on peut reconstituer le tableau initial avec les composantes principales et les axes principaux. Cette relation est appelée formule de reconstitution. Si on se limite aux k ($k < p$) premiers termes, on obtient une approximation du tableau initial :

Qualité de la représentation

Qualité globale

La qualité globale de représentation de l'ensemble initial X sur les k premières composantes principales est mesuré comme le pourcentage de variance expliquée :

$$\frac{\lambda_1 + \ldots + \lambda_k}{\text{trace}(S)} 100.$$

Contribution relative d'un axe à un individu

Sachant que l'inertie totale du nuage est $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{p}\|X_i\|^2$, la quantité $\frac{1}{n}\|X_i\|^2$ représente la part d'inertie apportée par chaque X_i.

Après projection sur l'axe $\boldsymbol{u}_\alpha$, l'inertie restante est donc $\frac{1}{n}(c_\alpha^i)^2$. Chacun des termes $\frac{1}{n}(c_\alpha^i)^2$ représente donc la part de l'inertie initial $\frac{1}{n}\|X_i\|^2$ qu'apportait l'individu i, conservée par l'axe α. Le rapport de ces deux quantités est appelée *contribution relative* du α axe factoriel à l'individu i et elle est notée $COR(i,\alpha)$:

$$COR(i,\alpha) = \frac{(c_\alpha^i)2}{\|X_i\|^2}.$$

Cette quantité représente aussi le carré du cosinus de l'angle formé par l'individu $ X_i$ et par le vecteur $\boldsymbol{u}_\alpha$. Si $COR(i,\alpha)$ est proche de 1, l'individu est bien représenté par cet axe, si $COR(i,\alpha)$ est au contraire proche de 0, l'individu est très mal représenté par cet axe.

$$QLT(i,k) = \frac{\sum_{\alpha=1}^{k}(c_\alpha^i)^2}{\|X_i\|^2} = \sum_{i=1}^{k} COR(i,\alpha).$$

Contribution relative d'un individu à un axe

En partant de la relation $\lambda_\alpha = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(c_\alpha^i)^2$, on peut décomposer λ_α, l'inertie conservée par l'axe $\boldsymbol{u}_\alpha$, selon les individus. On définit alors la contribution relative de l'individu i à l'axe α , notée $CTR(i,\alpha)$: c'est la part d'inertie du αaxe pris en compte (ou expliquée) par l'individu i. Nous avons :

$$CTR(i,\alpha) = \frac{1}{n}\frac{(c_\alpha^i)^2}{\lambda_\alpha}.$$

Section 2

Interprétation des nouvelles variables

Cercle des corrélations

- Chaque ancienne variable possède une corrélation avec les nouvelles variables.
- Ces corrélation sont utilisées pour interpréter les nouvelles variables en fonctions des anciennes.

$$\begin{aligned}\mathrm{cor}(X^j, C^k) = \mathrm{cor}(X^j, X\boldsymbol{u}_k) &= \frac{\mathrm{cov}(X^j, X\boldsymbol{u}_k)}{\sqrt{\mathbb{V}(X^j)\mathbb{V}(X\boldsymbol{u}_k)}} \\ &= \frac{\lambda_k u_k^j}{\sqrt{\frac{1}{n}\|X^j\|^2\lambda_k}}.\end{aligned}$$

car

- $\mathbb{V}(X\boldsymbol{u}_k) = \boldsymbol{u}_k^\top \boldsymbol{S}\boldsymbol{u}_k = \lambda_k$ (voir calcul précédent)
- $\mathrm{cov}(X^j, X\boldsymbol{u}_k) = \frac{1}{n}(X^j)^\top X\boldsymbol{u}_k$ est la j-ième coordonnée de $\frac{1}{n}X^\top X\boldsymbol{u}_k = \lambda_k\boldsymbol{u}_k$.

Si les variables ont été préalablement normalisées, on obtient

$$\mathrm{cor}(X^j, C^k) = \sqrt{\lambda_k}u_k^j.$$

Section 3

Un exemple d'ACP

Les données

Il s'agit du tableau de notes décrits. Rappelons que ces données regroupent les notes obtenues par neuf élèves dans les matières mathématiques, sciences, français, latin et dessin :

Table 1: Notes de 9 élèves

	math	scie	fran	lati	d.m
jean	6.0	6.0	5.0	5.5	8
aline	8.0	8.0	8.0	8.0	9
annie	6.0	7.0	11.0	9.5	11
monique	14.5	14.5	15.5	15.0	8
didier	14.0	14.0	12.0	12.5	10
andré	11.0	10.0	5.5	7.0	13
pierre	5.5	7.0	14.0	11.5	10
brigitte	13.0	12.5	8.5	9.5	12
evelyne	9.0	9.5	12.5	12.0	18

Centrage du tableau de données

Les moyennes des cinq variables sont respectivement 9.67, 9.83, 10.22, 10.05 et 11. Le tableau centré en colonne $\boldsymbol{X}$ est obtenu en soustrayant à chaque colonne la moyenne correspondante :

```
X<- scale(X,center=TRUE,scale = FALSE)
knitr::kable(X,format="latex", caption = "Tableau centré",digits = 2)
```

Table 2: Tableau centré

	math	scie	fran	lati	d.m
jean	-3.67	-3.83	-5.22	-4.56	-3
aline	-1.67	-1.83	-2.22	-2.06	-2
annie	-3.67	-2.83	0.78	-0.56	0
monique	4.83	4.67	5.28	4.94	-3
didier	4.33	4.17	1.78	2.44	-1
andré	1.33	0.17	-4.72	-3.06	2
pierre	-4.17	-2.83	3.78	1.44	-1
brigitte	3.33	2.67	-1.72	-0.56	1
evelyne	-0.67	-0.33	2.28	1.94	7

Matrice de variance

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{9}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$$

```
n<-nrow(X)
p<-ncol(X)
S<-var(X)*(n-1)/n
knitr::kable(S,format="latex", caption = "Matrice de variance",digits = 2)
```

Table 3: Matrice de variance

	math	scie	fran	lati	d.m
math	11.39	9.92	2.66	4.82	0.11
scie	9.92	8.94	4.12	5.48	0.06
fran	2.66	4.12	12.06	9.29	0.39
lati	4.82	5.48	9.29	7.91	0.67
d.m	0.11	0.06	0.39	0.67	8.67

Axes principaux d'inertie

La diagonalisation de la matrice de variance fournit les valeurs propres suivantes (rangées par ordre décroissant)

$$\lambda_1 = 28.2533, \lambda_2 = 12.0747, \lambda_3 = 8.6157, \lambda_4 = 0.0217, \lambda_5 = 0.0099.$$

et les vecteurs propres normés ou axes principaux d'inertie suivants

$$\boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} 0.51 \\ 0.51 \\ 0.49 \\ 0.48 \\ 0.03 \end{pmatrix}, \boldsymbol{u}_2 = \begin{pmatrix} -0.57 \\ -0.37 \\ 0.65 \\ 0.32 \\ 0.11 \end{pmatrix}, \boldsymbol{u}_3 = \begin{pmatrix} -0.05 \\ -0.01 \\ 0.11 \\ 0.02 \\ -0.99 \end{pmatrix}, \boldsymbol{u}_4 = \begin{pmatrix} 0.29 \\ -0.55 \\ -0.39 \\ 0.67 \\ -0.03 \end{pmatrix}, \boldsymbol{u}_5 = \begin{pmatrix} -0. \\ 0. \\ -0. \\ 0. \\ -0. \end{pmatrix}$$

Qualité de la représentation

- les inerties du nuage projeté sur les 5 axes sont égales aux valeurs propres.
- l'inertie du nuage est égale à trace(S), c'est-à-dire aussi à la somme des valeurs propres, ici 48.975.
- les pourcentages d'inertie expliquée par chaque axe sont donc de 57.69, 24.65, 17.59, 0.04 et 0.02.
- Les pourcentages d'inertie expliquée par les sous-espaces principaux sont 57.69, 82.34, 99.94, 99.98 et 100.00.
- le nuage initial est pratiquement dans un espace de dimension 3.

Composantes principales $C = XU$

```
U<-eigen(S)$vectors ; Lambda<-eigen(S)$values ; C = X%*%U
knitr::kable(C,format="latex",
             caption = "Composantes principales",digits = 2)
```

Table 4: Composantes principales

jean	-8.70	1.70	2.55	-0.15	-0.12
aline	-3.94	0.71	1.81	-0.09	0.04
annie	-3.21	-3.46	0.30	0.17	0.02
monique	9.76	-0.22	3.34	-0.17	0.10
didier	6.37	2.17	0.96	0.07	-0.19
andré	-2.97	4.65	-2.63	-0.02	0.15
pierre	-1.05	-6.23	1.69	0.12	0.04
brigitte	1.98	4.07	-1.40	0.24	0.01
evelyne	1.77	-3.40	-6.62	-0.16	-0.06

Ces composantes principales permettent d'obtenir, par exemple, les plans de représentation l,2 et 1,3 suivants

Contributions relatives des axes aux individus

```
COR<- C^2 / rowSums(X^2)
knitr::kable(COR,format="latex",
             caption = "Contribution relative des axes aux individus",
             digits = 2)
```

Table 5: Contribution relative des axes aux individus

jean	0.89	0.03	0.08	0	0
aline	0.80	0.03	0.17	0	0
annie	0.46	0.53	0.00	0	0
monique	0.89	0.00	0.11	0	0
didier	0.88	0.10	0.02	0	0
andré	0.24	0.58	0.19	0	0
pierre	0.03	0.91	0.07	0	0
brigitte	0.17	0.74	0.09	0	0
evelyne	0.05	0.20	0.75	0	0

Contributions relatives des individus aux axes

```
CTR<- 1/n* C^2 /  matrix(eigen(S)$values,n,p,byrow = TRUE)
knitr::kable(CTR,format="latex",
             caption = "Contributions relatives des individus aux axes",
             digits = 2)
```

Table 6: Contributions relatives des individus aux axes

jean	0.30	0.03	0.08	0.11	0.15
aline	0.06	0.00	0.04	0.04	0.02
annie	0.04	0.11	0.00	0.15	0.00
monique	0.37	0.00	0.14	0.15	0.11
didier	0.16	0.04	0.01	0.03	0.40
andré	0.03	0.20	0.09	0.00	0.25
pierre	0.00	0.36	0.04	0.07	0.02
brigitte	0.02	0.15	0.03	0.30	0.00
evelyne	0.01	0.11	0.56	0.14	0.04

Les vecteurs $\boldsymbol{d}^\alpha$, composantes principales associées aux différentes variables, sont formés des coordonnées de toutes les variables pour un même axe $\boldsymbol{v}_\alpha$ et vérifient la relation

$$\boldsymbol{d}^\alpha = \sqrt{\lambda_\alpha}\boldsymbol{u}_\alpha.$$

On obtient

```
D<- U * matrix(sqrt(Lambda),p,p,byrow=TRUE)
knitr::kable(D,format="latex",
             caption = "Variables",digits = 2)
```

Table 7: Variables

2.73	1.97	-0.15	-0.04	0.06
2.69	1.29	-0.04	0.08	-0.05
2.62	-2.26	0.32	0.06	0.04
2.58	-1.12	0.07	-0.10	-0.05
0.16	-0.39	-2.91	0.01	0.00

Analyse dans R^n

Il est souvent préférable de représenter la projection des variables initiales normées. Il suffit de diviser chaque ligne du tableau précédent par la norme de la variables correspondante

$$\|\boldsymbol{x}^j\|^2 = \frac{1}{9}\sum_{i=1}^{9}(x_i^j)^2.$$

Les $\|\boldsymbol{x}^j\|$ correspondent en fait aux écarts-type des variables. On obtient respectivement 3.37, 2.99, 3.47, 2.81 et 2.94

```
F<- D / sqrt((1/n*colSums(X^2)))
knitr::kable(F,format="latex",
             caption = "Variables normées",digits = 2)
```

Table 8: Variables normées

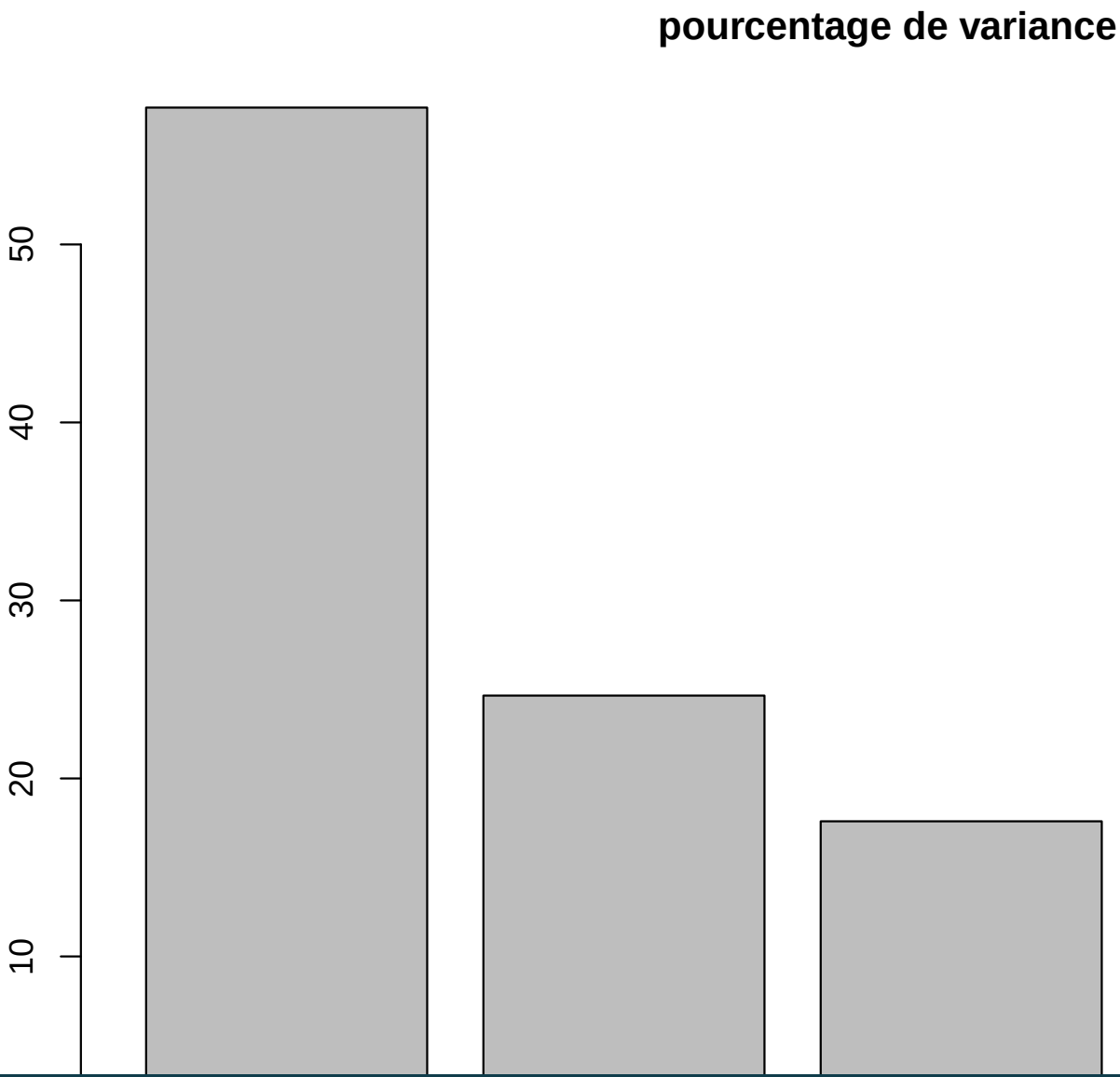
0.81	0.58	-0.04	-0.01	0.02
0.90	0.43	-0.01	0.03	-0.02
0.75	-0.65	0.09	0.02	0.01
0.92	-0.40	0.02	-0.04	-0.02
0.06	-0.13	-0.99	0.00	0.00

L'ACP avec FactoMineR

```
library(FactoMineR)
res.pca<-PCA(X, scale.unit=FALSE, ncp=5, graph=FALSE)
```

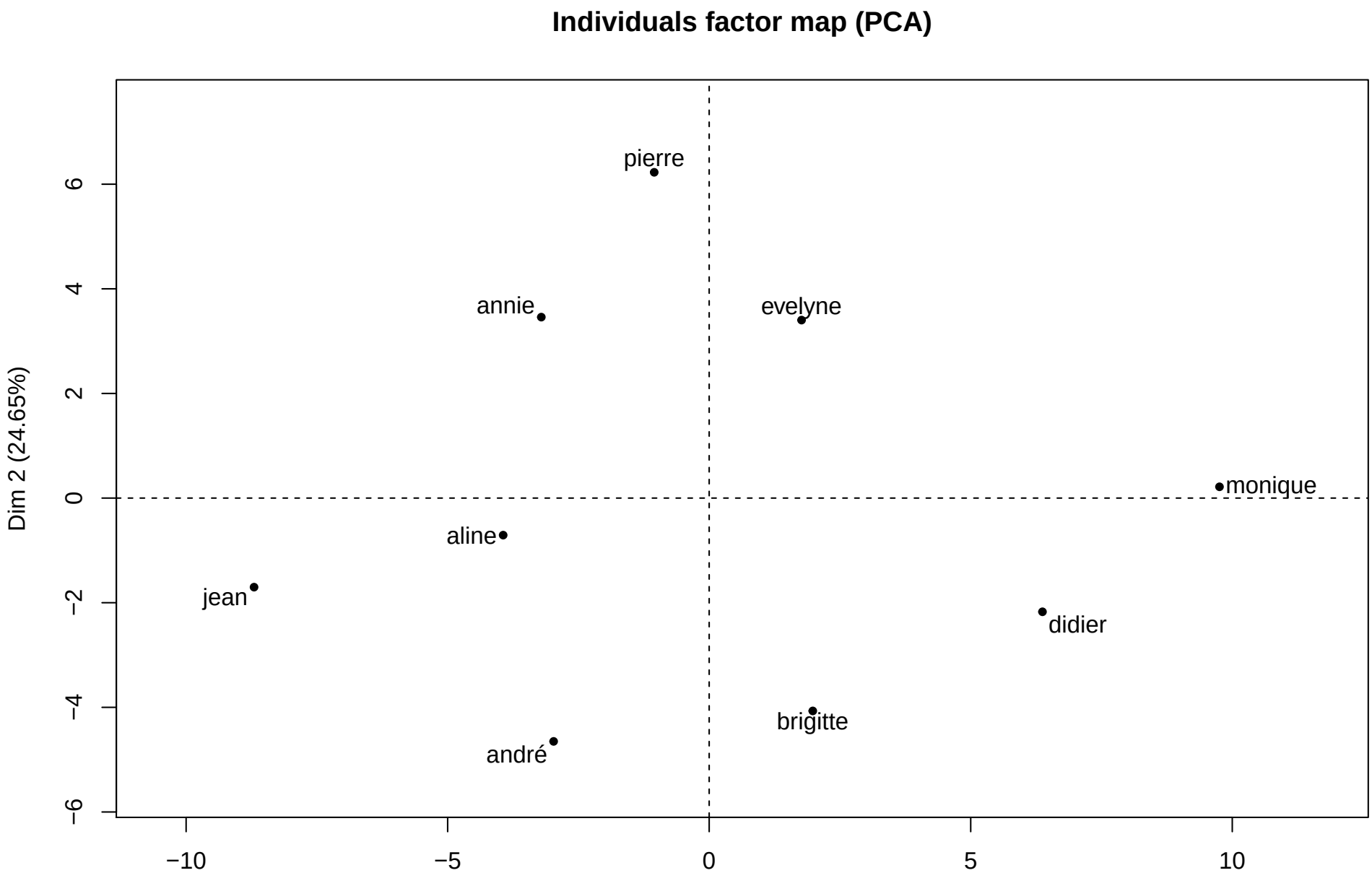
Variances expliquées

```
eigvalues<-data.frame(res.pca$eig)
barplot(eigvalues$percentage.of.variance, names.arg=row.names(eigvalues),mai
```



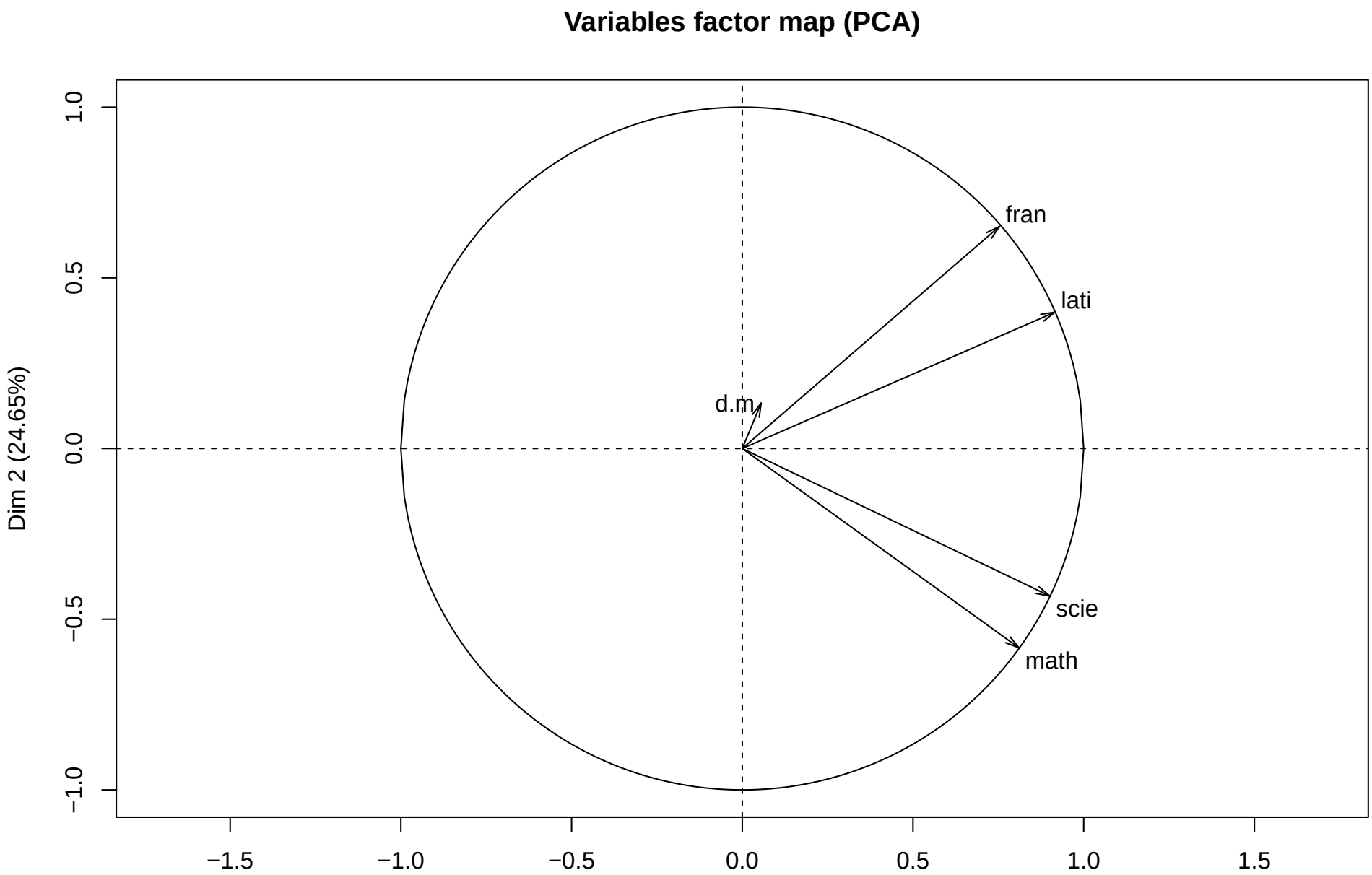
Représentation des individus

```
plot(res.pca,choix="ind")
```



Représentation des variables

```
plot(res.pca,choix="varcor")
```



Contribution relative des axes aux individus

```
knitr::kable(res.pca$ind$cos2,format="latex",
             caption = "Contribution relative des axes aux individus",
             digits = 2)
```

Table 9: Contribution relative des axes aux individus

	Dim.1	Dim.2	Dim.3	Dim.4	Dim.5
jean	0.89	0.03	0.08	0	0
aline	0.80	0.03	0.17	0	0
annie	0.46	0.53	0.00	0	0
monique	0.89	0.00	0.11	0	0
didier	0.88	0.10	0.02	0	0
andré	0.24	0.58	0.19	0	0
pierre	0.03	0.91	0.07	0	0
brigitte	0.17	0.74	0.09	0	0
evelyne	0.05	0.20	0.75	0	0

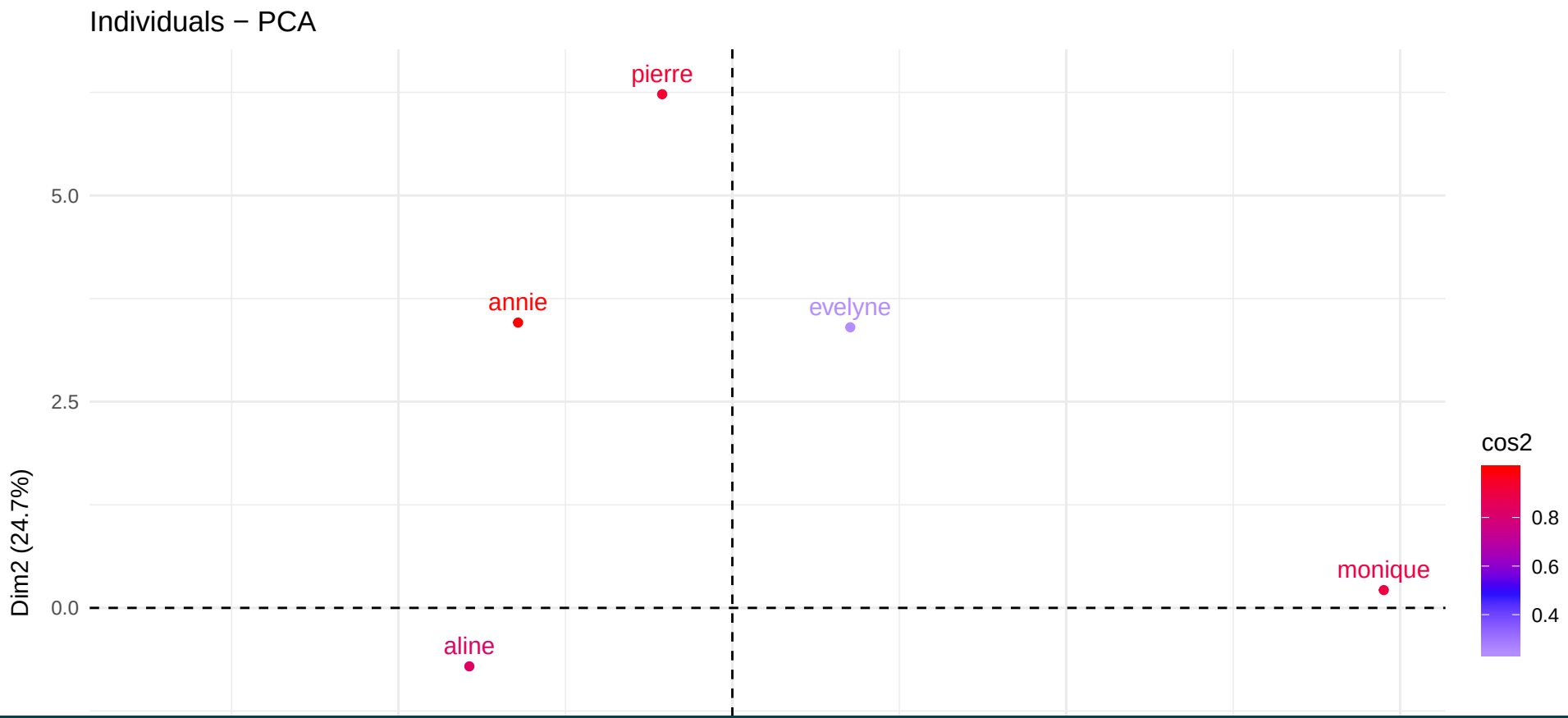
Contribution relative des axes aux individus

```
library(factoextra)
```

```
## Loading required package: ggplot2
```

```
## Welcome! Related Books: `Practical Guide To Cluster Analysis in R` at ht
```

```
fviz_pca_ind(res.pca, col.ind="cos2") + scale_color_gradient2(low="white", mi
high="red", midpoint=0.50) + theme_minimal()
```



Contribution des individus aux axes

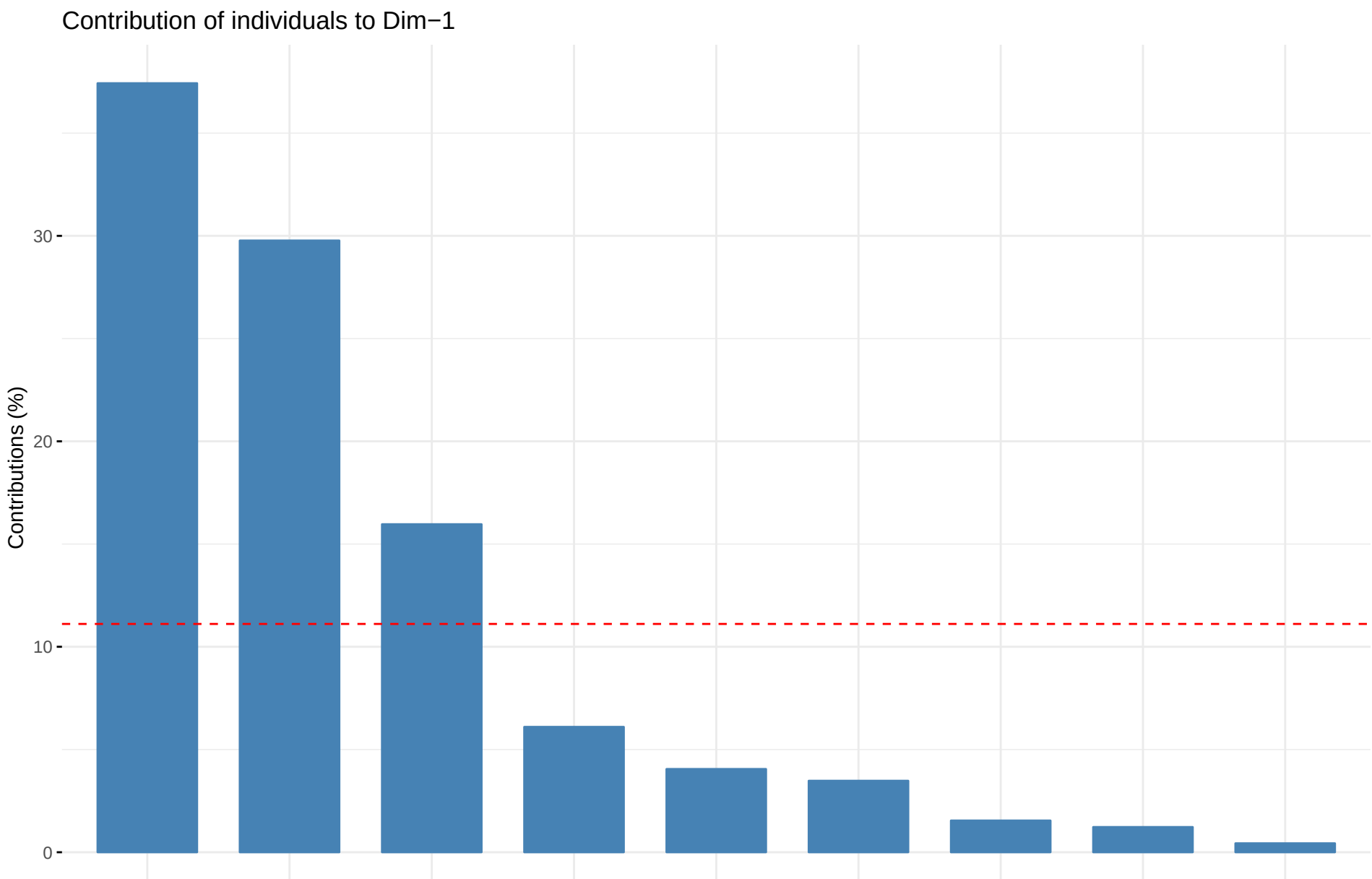
```
knitr::kable(res.pca$var$contrib,format="latex",
             caption = "Contribution des individus aux axes",
             digits = 2)
```

Table 10: Contribution des individus aux axes

	Dim.1	Dim.2	Dim.3	Dim.4	Dim.5
math	26.47	32.14	0.26	8.34	32.78
scie	25.70	13.84	0.02	30.59	29.85
fran	24.24	42.30	1.17	15.50	16.79
lati	23.49	10.45	0.05	45.45	20.56
d.m	0.09	1.27	98.50	0.12	0.02

Contribution des individus aux axes

```
fviz_contrib(res.pca, choice = "ind", axes = 1)
```



Section 4

Interprétation statistique de l'ACP

Modèle d'ACP probabiliste pour une variable latente continue

- soit une variable latente explicite $\boldsymbol{z}$ de loi

$$p(\boldsymbol{z}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}).$$

- distribution conditionnelle gaussienne pour la variable observée $\boldsymbol{x}$

$$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{U}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu}, \sigma^2\boldsymbol{I})$$

- les colonnes de $\boldsymbol{U}$ engendrent un sous-espace qui correspond au sous-espace principal.
- la loi marginale de $\boldsymbol{x}$ est un mélange continu

$$p(\boldsymbol{x}) = \int p(\boldsymbol{z})p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{z})d\boldsymbol{z}$$

et donc

$$p(\boldsymbol{x}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

avec $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^t + \sigma^2\boldsymbol{I}$

Modèle d'ACP probabiliste pour une variable latente continue

La vecteur $p - dimensionel$ observé $\boldsymbol{x}$ est défini comme une transformation linéaire du vecteur $d - dimensionel$ $\boldsymbol{z}$ bruité par un bruit gaussien.

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{z} + \boldsymbol{\mu} + \epsilon$$

avec $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$

L'inférence par maximum de vraisemblance rejoint l'ACP traditionnelle.

Section 5

Analyse factorielle d'un tableau de distance

Historique

- Technique due à Torgerson (1952, 1958) et Gower (1966).
- connue sous les noms de
  - Classical Scaling
    - Torgerson Scaling
    - Principal coordinate analysis (analyse en coordonnées principale)
    - analyse du triple (Benzecri 1973)

1. objets (décrits par X)
2. pairs d'objets (P_X)
3. dissimilarité sur les pairs (δ)

Principe

- supposer que les dissimilarités sont des distances et
- trouver les coordonnées principales qui expliquent le tableau de distance.

Notations

- $$X = \begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \dots & x_{np} \end{pmatrix}$$

  un tableau de données centré (translation du vecteur moyenne)
- à partir de D^2 la matrice des distances au carré entres les objets décrits par X

Tableau centré

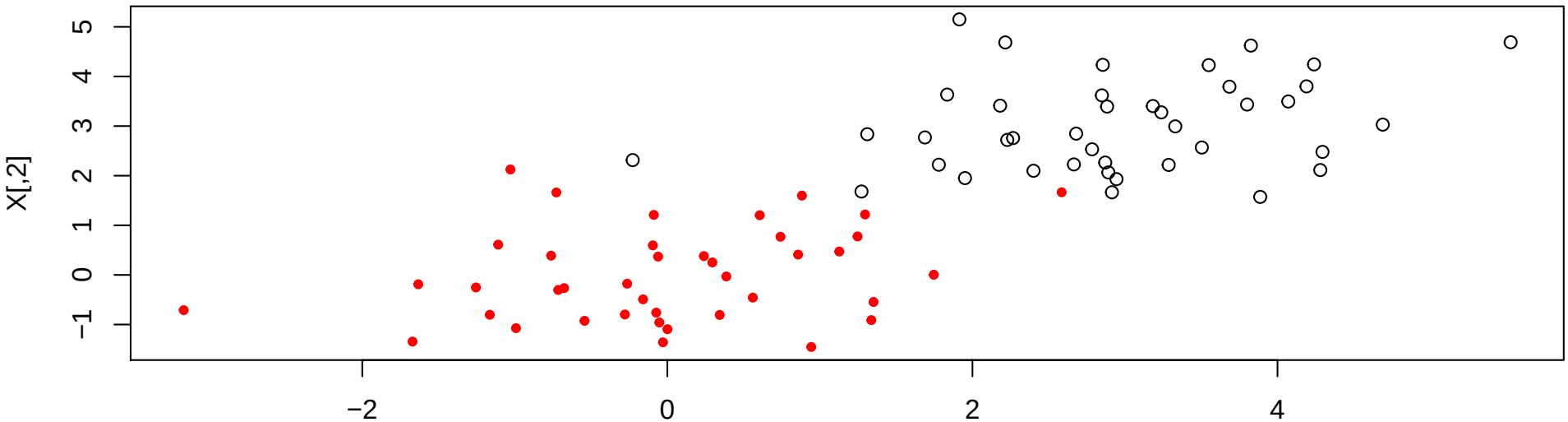
```
X<-matrix(rnorm(mean=3,40*2),nrow=40)
meanX<-apply(X,2,mean,digits=2)
print(meanX,digits=2)
```

```
## [1] 2.9 3.0
```

```
Y <- X - matrix(1,40,1) %*% rbind(meanX)
meanY<-apply(Y,2,mean)
print(meanY,digits=2)
```

```
## [1] -4.4e-17  1.7e-16
```

```
plot(X,pch=21,xlim=range(rbind(X,Y)[,1]),ylim=range(rbind(X,Y)[,2]))
points(Y,pch=20,col=2)
```



Distance et tableau de données

- Comment calculer la matrice des distances à partir de X ?

$$\begin{aligned} d_{ij}^2 &= \sum_{a=1}^{p}(x_{ia}^2 + x_{ja}^2 - 2x_{ia}x_{ja}) \\ &= \sum_{a=1}^{p} x_{ia}^2 + \sum_{a=1}^{p} x_{ja}^2 - 2\sum_{a=1}^{p} x_{ia}x_{ja} \end{aligned}$$

- d'où

$$D^2 = diag(XX^t)\mathbb{I}_{(1,n)} + \mathbb{I}_{(n,1)}diag(XX^t)^t - 2XX^t$$

Calcul de distances en R (`dist()` fonctionne aussi...)

```
X<-matrix(rnorm(8),ncol=2)
n<-nrow(X)
sum.of.squares<- rowSums(X^2)
D2 <- cbind(sum.of.squares)%*% matrix(1,1,n) +
      matrix(1,n,1) %*% rbind(sum.of.squares) -
      2 * X%*%t(X)
```

Calcul de distances en R (`dist()` fonctionne aussi...)

```
print(sqrt(D2),digits=2)
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,] 0.00 0.28 1.37 1.01
## [2,] 0.28 0.00 1.62 1.28
## [3,] 1.37 1.62 0.00 0.93
## [4,] 1.01 1.28 0.93 0.00
```

```
print(dist(X),digits=2)
```

```
##      1    2    3
## 2 0.28
## 3 1.37 1.62
## 4 1.01 1.28 0.93
```

Distance et tableau de données (suite)}

- Soit J la matrice de centrage,
$$J = I - \frac{1}{n}\mathbb{I}_{(n,n)}$$
- Centrage de X en colonnes
$$JX = X - \frac{1}{n}\mathbb{I}_{(n,n)}X$$
- Centrage de X en lignes
$$X^t J = X^t - \frac{1}{n}X^t\mathbb{I}_{(n,n)}X$$

Problème: on connait D^2, on voudrait X: Double centrage

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}JD^2J &= -\frac{1}{2}Jdiag(XX^t) * \mathbb{I}_{(1,n)}J \\ &\quad -\frac{1}{2}J\mathbb{I}_{(n,1)}diag(XX^t)^tJ \\ &\quad +JXX^tJ \\ &= XX^t \end{aligned}$$

Produit scalaire et coordonnées principales

- pour trouver les coordonnées MDS à partir de $B = XX^t$, on peut utiliser la décomposition spectrale de B

$$\begin{aligned} B &= C\Lambda C^t \\ &= (C\Lambda^{\frac{1}{2}})(C\Lambda^{\frac{1}{2}})^t \\ &= XX^t \end{aligned}$$

- l'analyse du triple consiste à remplacer la matrice D^2 par la matrice du carré des dissimilarités Δ^2

Algorithme

1. Calculer la matrice Δ^2
2. Double centrage de Δ^2:

$$B_{\Delta^2} = -\frac{1}{2} J \Delta^2 J$$

3. Décomposition spectrale de $B_{\Delta^2}\sim$:

$$B_{\Delta^2} = C \Lambda C^t$$

4. Soit m la dimension de représentation choisie pour la solution.

- Λ_+ est la matrice des m plus grandes valeurs propres, classées par ordre décroissant sur la diagonale.
- C^+ est la matrice des m vecteurs propres correspondants.
- **La solution du problème** est

$$X = C^+ \Lambda_+^{\frac{1}{2}}$$

Critère optimisé

- le critère optimisé est

$$\begin{aligned} L(X) &= || - \frac{1}{2} J(D^2(X) - \Delta^2)J||^2 \\ &= ||XX^t + \frac{1}{2} J\Delta^2)J||^2 \\ &= ||XX^t - B_\Delta||^2 \end{aligned}$$

- remarques
  - Si Δ est une matrice de distances alors l'analyse du triple trouve les composantes principales d'une ACP considérant une métrique $M = I$
  - Si Δ est une matrice de dissimilarité alors certaines composantes principales seront négatives!

Exemples d'application sous R

La fonction `cmdscale` du module `MASS`

```
Classical (Metric) Multidimensional Scaling

Description
Classical multidimensional scaling of a data matrix.
Also known as principal coordinates analysis (Gower, 1966).

Usage
cmdscale(d, k = 2, eig = FALSE, add = FALSE, x.ret = FALSE)
```

En R

```
library(MASS)
data(swiss)
swiss.x <- as.matrix(swiss[, -1])

swiss.pca<-cmdscale(dist(swiss.x),k=5,eig=TRUE)
swiss.pca$eig
```

```
##  [1]  8.648449e+04  2.112744e+04  2.706138e+03  6.392245e+02  3.480073e+
##  [6]  6.366270e-12  5.049680e-12  4.806995e-12  3.742979e-12  3.299345e-
## [11]  2.582295e-12  1.282168e-12  1.237885e-12  9.035419e-13  6.749936e-
## [16]  5.995660e-13  5.146883e-13  4.363656e-13  4.269951e-13  4.086160e-
## [21]  3.924628e-13  3.546247e-13  2.852941e-13  2.493990e-13  2.277657e-
## [26]  2.084816e-13  1.397871e-13  1.183306e-13  2.008992e-14 -2.573070e-
## [31] -3.324318e-13 -5.271718e-13 -7.493299e-13 -7.671986e-13 -8.638812e-
## [36] -1.059992e-12 -1.101320e-12 -1.133792e-12 -1.308953e-12 -1.566165e-
## [41] -1.733716e-12 -1.843208e-12 -2.075134e-12 -2.079606e-12 -2.157792e-
## [46] -6.311337e-12 -8.764151e-12
```

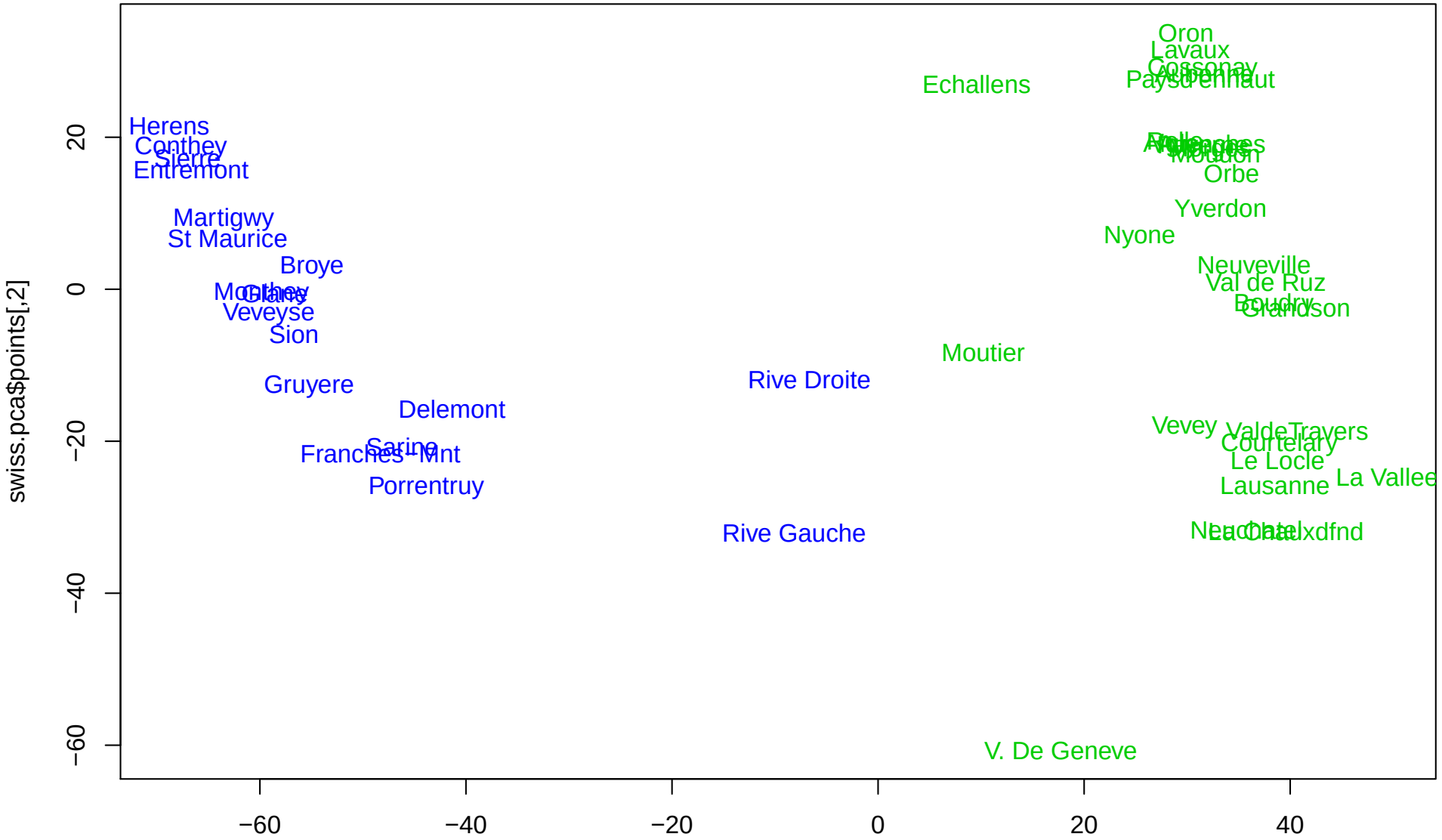
```
swiss.pca$GOF
```

```
## [1] 1 1
```

```
swiss.pca<-cmdscale(dist(swiss.x),k=2,eig=TRUE)
```

Représenation des deux premières composantes

```
plot(swiss.pca$points, type = "n")
text(swiss.pca$points,row.names(swiss.x),col = 3 + (swiss$Catholic > 50))
```



Evaluation par diagramme de Shepard

- distances d_{ij} en fonction des dissimilarités δ_{ij}
- distances d_{ij} en fonction des disparités $\hat{d}_{ij}$
- plus le nuage est concentré, meilleur est l'approximation
- détection de couples d'outliers

```
swiss.sh<- Shepard(dist(swiss.x), swiss.pca$points)
plot(swiss.sh, pch = ".",ylab="distances dans l'espace reduit")
lines(swiss.sh$x, swiss.sh$yf, type = "S")
```