

Analyse en Composantes Principales

Paul Chapron ¹ & Yann Ménéroux ¹

2021-2022

¹IGN-ENSG-UGE

ENSG
Géomatique

ÉCOLE NATIONALE
DES SCIENCES
GÉOGRAPHIQUES

Introduction

Techniques pour quantifier la liaison entre **deux** variables (quali ou quanti).

- corrélation
- régression linéaire
- χ^2 (test d'indépendance)
- visualisation adéquate

La plupart des phénomènes intéressants (sociaux, spatiaux) sont **multi-factoriels**. Les données disponibles pour les décrire sont :

- partiellement **redondantes** : e.g. revenu et profession
- intrinsèquement **corrélées** : e.g. revenu et taille du logement
- parfois des proportions (somme à 1 ou 100%)

L'analyse **factorielle** cherche à réduire la **colinéarité** et le **nombre de dimensions** (=variables) qui décrivent une population ...

... en proposant de nouvelles variables **composites décorrélées**.



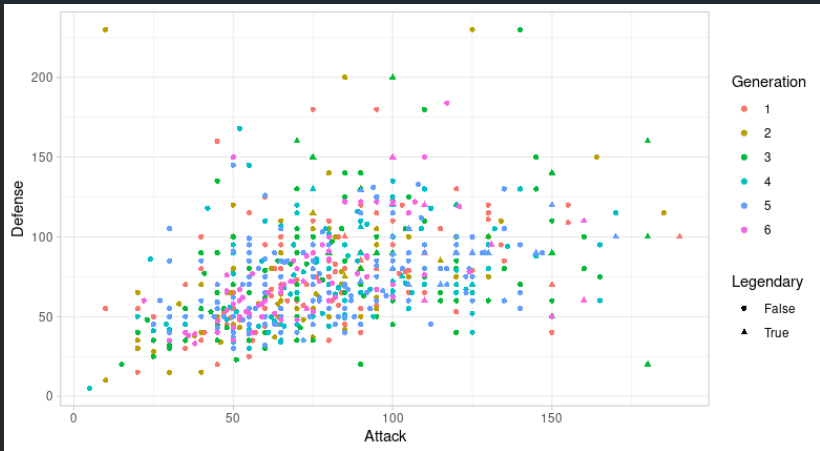
- Nom e.g. "Pikachu"
- Type 1 $\in \{Grass, Fire, Water, Bug, \dots\}$
- Type 2 idem
- HP : numérique
- Attack : numérique
- Defense : numérique
- Speed : numérique
- Special Attack :numérique
- Special Defense : numérique
- Generation : facteur $\in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$
- Legendary : booléen

Existe-t-il des combinaisons qui **résumant bien** les caractéristiques des pokemons ? (moins de six!)

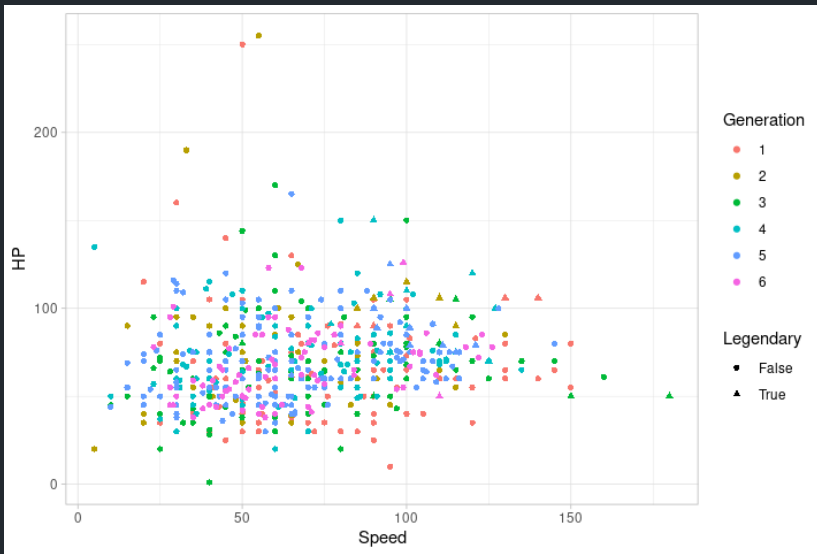
Comment les constituer ?

i.e. comment **combiner** les six variables numériques pour bien **expliquer leur variation** au sein de la population ?

Attack vs. Defense



Speed vs. HP



L'inertie

L'inertie est l'équivalent **multi-dimensionnel** de la **variance** d'une variable.

C'est une notion centrale de l'ACP.

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

Avec

- n la taille de la population
- x_i la valeur de la variable de l'individu i
- g le point moyen
- $d(x, y)$ une distance, souvent euclidienne : $(x_i - g_i)^2$

L'inertie quantifie la **dispersion** du nuage de points

L'inertie est la "moyenne du carré des distances", ou encore la **somme des variances** des variables

Inertie faible \implies peu de variété dans les variables, individus semblables, faible quantité d'information

Soit une population P de n individus décrits par une variable X
l'inertie de la population est la **variance** de X :

$$I = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

Le point moyen a pour "coordonnées" \bar{x}

Soient X et Y deux variables qui décrivent des individus p_i de la population P , et $g = (x_g, y_g)$ le point moyen de cette population, de coordonnées $x_g = \bar{x}$ et $y_g = \bar{y}$.

L'inertie de P est :

$$I = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - x_g)^2 + (y_i - y_g)^2$$

On reconnaît une somme de variances : $I = \text{var}(X) + \text{var}(Y)$

Soient v variables , notées $X^{(k)}$, $k \in \{1, \dots, v\}$ qui décrivent les individus d'une population P , le point moyen de P est noté g .

L'inertie de P est :

$$I = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^v \sum_{i=1}^n (x_i^{(k)} - x_g^{(k)})^2$$

on reconnaît

$$I = \sum_{k=1}^v \text{var}(X^{(k)})$$

Espaces, vecteurs, axes, variables

L'ACP considère une population statistique décrite par plusieurs variables (continues).

Ces variables définissent un **espace vectoriel**, qu'on va appeler l'espace d'**origine**:

- un individu i est un **vecteur**
- la valeur de ses variables sont les **coordonnées** du vecteur dans cet espace.
- chaque variable est une **dimension** de cet espace. elle définit un **axe** de l'espace. (cf. axe des x dans un repère orthonormé)

Les variables étant potentiellement **corrélées**, les axes de l'espace de départ ne sont pas toujours (presque jamais) orthogonaux !

Les individus sont des vecteurs dans l'espace des variables
mais également

Les variables sont des vecteurs dans l'espace des individus

L'ACP consiste à trouver de **nouveaux axes orthogonaux entre eux**, qui capturent le **plus d'inertie possible** de la population P .

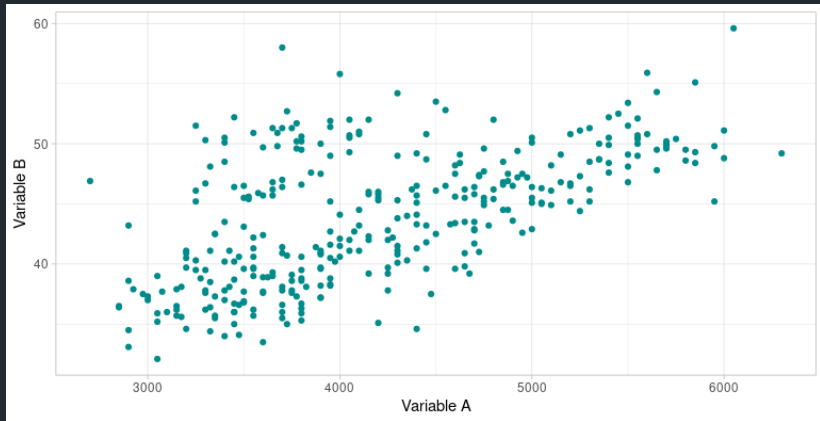
Ces axes définiront un nouvel espace : l'**espace d'arrivée**

On trouve ces axes en combinant (linéairement), les variables de la population P , par exemple :

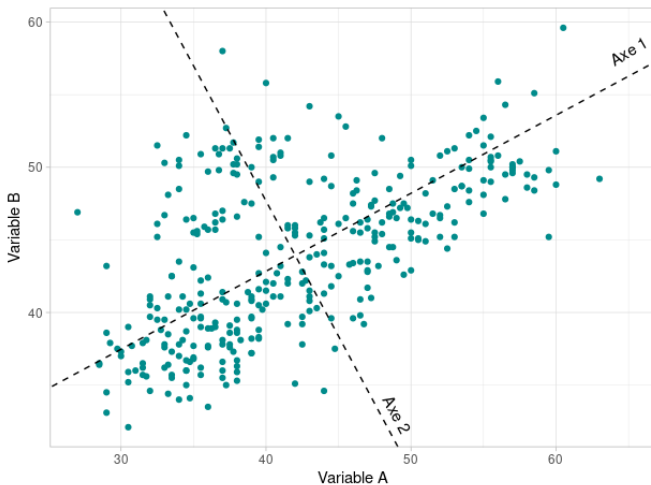
$$\text{axe}_1 = \alpha X + \beta Y + \gamma Z$$

La composition de ces combinaisons (les valeurs de α, β, γ) pour chaque axe est donnée en résolvant un système d'équations algébriques

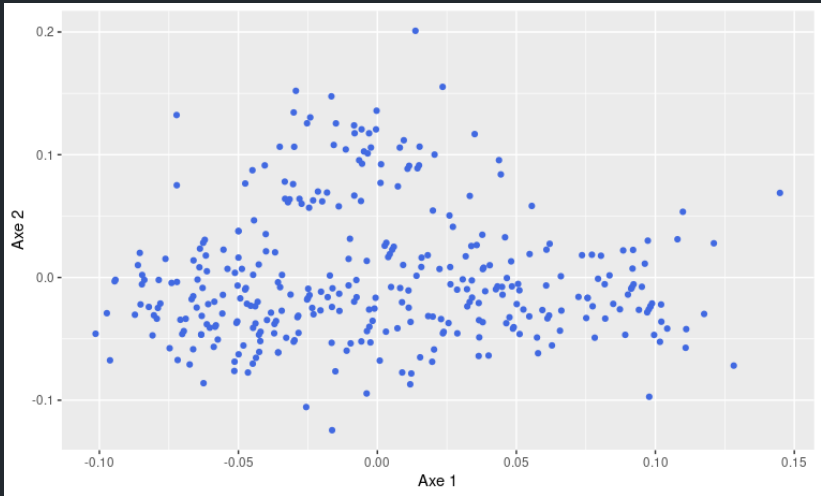
Espace de départ



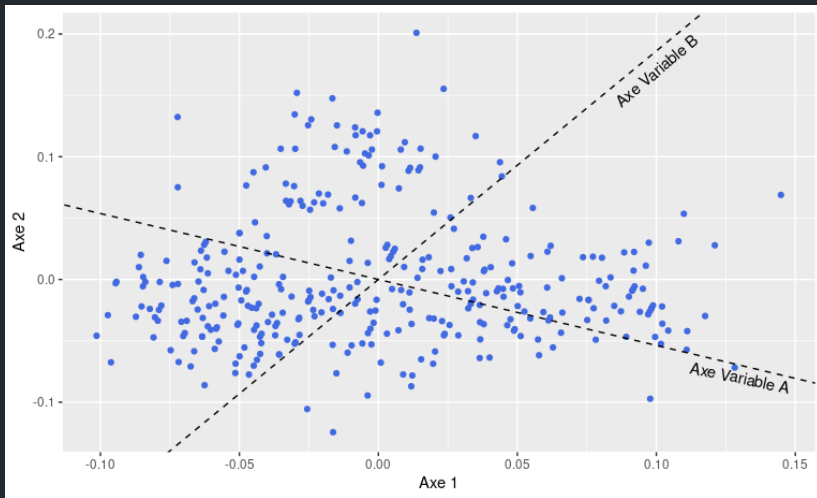
Espace de départ + Les axes de l'espace d'arrivée



Espace d'arrivée



Espace d'arrivée + les axes de l'espace de départ



espace de départ \rightarrow ACP \rightarrow espace d'arrivée

Les **axes** sont les **vecteurs propres** de la matrice de corrélation de P , Cor_P . On peut les calculer (ouf !)

l'ACP est le calcul d'une transformation linéaire qui **re-projette** des vecteurs-individus dans un nouvel **espace** – l'espace d'arrivée – constitué par les **nouveaux axes**.

On appelle ces axes **composantes**, elles sont **linéairement indépendantes** et forment une **base** de l'espace d'arrivée.

L'ACP capture l'inertie de P en créant des composantes (les vecteurs propres de Cor_P).

Il y a autant de composantes possibles que de dimensions de l'espace de départ.

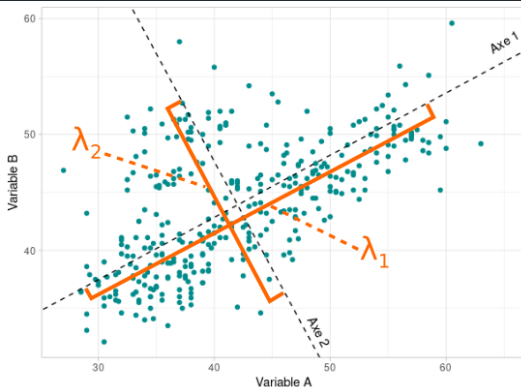
L'intérêt de l'ACP est de pouvoir se limiter à **quelques** composantes pour à la fois

- capturer suffisamment l'inertie (\approx l'information) de P
- réduire la dimensionnalité (\approx complexité) de P

Vecteurs propres et valeurs propres dans le cas de l'ACP

Les **vecteurs propres** définissent la **direction** des axes.

Une **valeur propre** associée à un vecteur propre quantifie la **dispersion** des points le long de l'axe orienté par le vecteur propre.



L'inertie capturée par une composante k est sa valeur propre , λ_k

On ordonne les composantes par valeur propre décroissantes:

La 1^{ère} composante correspond au vecteur propre de plus grande valeur propre, elle capture la plus grande proportion d'inertie

La 2^{nde} composante correspond au vecteur propre de la seconde plus grande valeur propre , elle capture la seconde plus grande proportion d'inertie

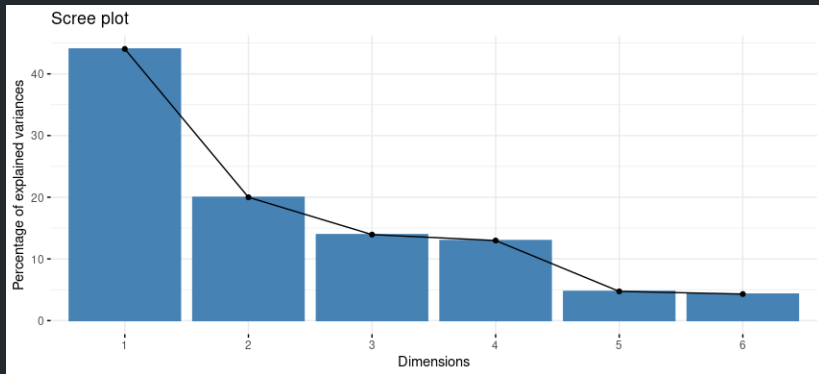
et ainsi de suite.

Si les variables sont centrées et réduites, leur somme vaut $Dim(P)$

Interpréter les résultats d'une ACP

- **Dimensionnalité** : L'essentiel de l'inertie est-elle exprimée en peu de dimensions dans l'espace d'arrivée ?
- **Colinéarité des variables** : Comment les variables de l'espace de départ sont-elles corrélées entre elles et aux axes de l'espace d'arrivée ?
- **Contribution** : À quel point Individus et Variables contribuent aux axes de l'espace d'arrivée ?
- **Représentation** : Les Individus et Variables sont-ils-elles bien représentés par les axes de l'espace d'arrivée ?

Le **scree plot** montre la proportion d'inertie capturée par les différentes composantes. La valeur propre associée aux vecteurs propres (axes) est proportionnelle à l'inertie capturée.



Idéalement, les premières (2 ou 3) composantes capturent une partie significative (e.g. $\gtrsim 50\%$ de l'inertie de P)

Cela signifie que les composantes **résumement bien** l'information contenue dans les variables de P , en **peu de dimensions**.

Pour profiter du "résumé" de l'ACP, il faut se limiter à un certain nombre de composantes pour définir l'espace d'arrivée dans lequel on reconstituera les individus et variables.

Heuristiques du choix du nombre:

- On garde les q axes que l'on sait **interpréter** : 2 ou 3 !
- "coude" dans le scree-plot.
- ne conserver que les $\lambda > 1$ ou $\lambda > 2$
- Karlis-Saporta-Spinaki : conserver les λ t.q. $\lambda > 1 + 2\sqrt{\frac{p-1}{n-1}}$
- Gavish & Donoho (2014) : $\lambda = \frac{4\sigma\sqrt{n}}{\sqrt{3}}$ avec σ le bruit estimé dans les données.

Avec λ , les valeurs propres associées aux axes, p le nombre de variable de P , et n la taille de P

En pratique , si on sélectionne q composantes, il faudra projeter les individus et les variables dans C_q^2 plans pour les visualiser.

Si $q = 3$, il faut 3 graphiques $\{(q_1, q_2), (q_2, q_3), (q_1, q_3)\}$.

Si $q = 4$, il en faut 6 !

On sait passer de l'espace de départ à l'espace d'arrivée : On peut **projeter** les variables et les individus dans l'espace d'arrivée

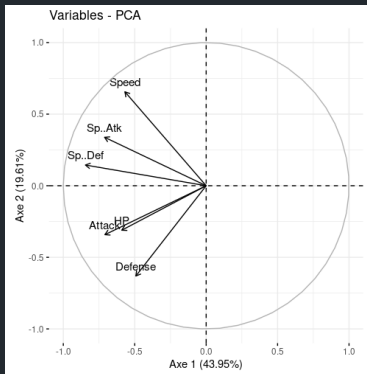
De cette projection on tire beaucoup d'information utiles:

- corrélations de variables
- contribution / représentation des variables
- contribution / représentation des individus
- regroupements d'individus

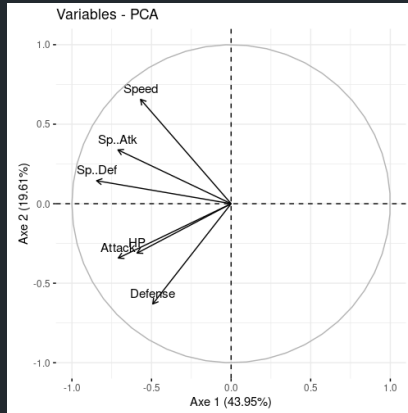
**Projection des variables :
colinéarité, contribution , qualité de
la représentation**

Rappel : les variables sont des vecteurs dans l'espace des individus.

On peut projeter les variables dans l'espace d'arrivée :



Si les variables sont centrées et réduites lors de l'ACP, on peut les représenter dans un cercle de corrélation et évaluer visuellement leur corrélation

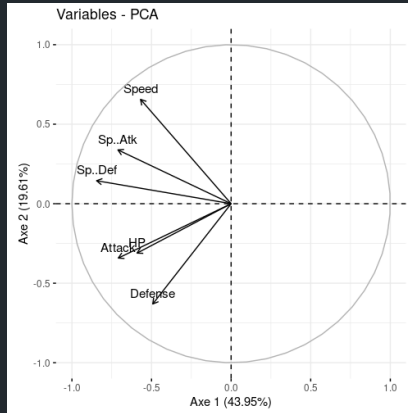


Variable \leftrightarrow Flèche

Coordonnées de la variable \leftrightarrow **corrélation linéaire** avec les composantes

Proximité au cercle \leftrightarrow qualité de **représentation** de la variable

Angle des variables \leftrightarrow corrélation des variables entre elles



- la corrélation de Defense avec l'Axe 1 est de -0.5
- Attack et HP sont très corrélées
- Speed et Defense sont (linéairement) indépendantes

Ici : regroupement de variables ? Oui !

La **contribution** d'une variable v à l'inertie de l'axe k est la coordonnée carrée de v sur l'axe k divisée par son inertie.

$$Contrib_{vk} = \frac{c_{vk}^2}{\lambda_k}$$

Plus la contribution d'une variable est élevée , plus elle est importante pour expliquer la variabilité de P

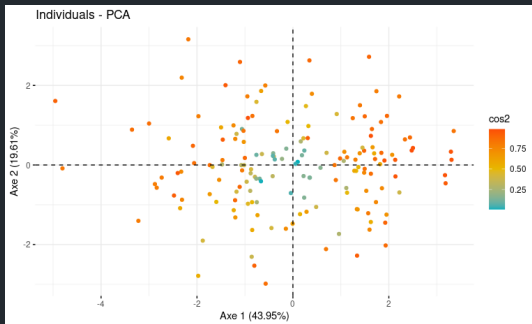
La **qualité de représentation** d'une variable v par l'axe k est la coordonnée carrée de v sur l'axe k :

$$Qlt_{vk} = c_{vk}^2$$

**Projection des individus:
contribution , qualité de la
représentation**

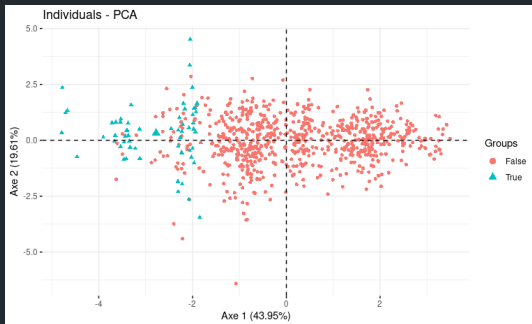
Rappel : les individus sont des vecteurs dans l'espace des variables de P .

On peut projeter les individus dans l'espace d'arrivée :



une fois projetés, les individus similaires sont proches. Parfois cela fait apparaître des regroupements (ici, pas vraiment)

Il est parfois pertinent de colorer les individus projetés par une variable tierce (i.e. non inclus dans P_i lors du calcul des composantes)



Ici : PCA sur toutes les générations de Pokemons, individus projetés sur (Axe_1 , Axe_2), colorés selon le facteur Legendary

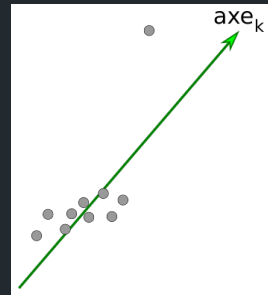
La **contribution** de l'individu i à l'axe k s'écrit :

$$Contrib_{ik} = \frac{p_i c_{ik}^2}{\lambda_k}$$

Avec :

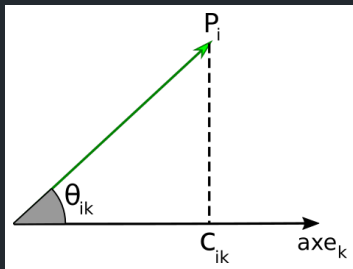
- c_{ik} la coordonnée de i selon k
- p_i le poids de l'individu, à poids constants $\forall i, p_i = \frac{1}{n}$
- λ_k la valeur propre associée à l'axe k

- Plus la valeur $Contrib_{ik}$ est extrême, plus elle influe sur la direction de l'axe k
- la coordonnée doit être rapportée à l'étirement du nuage de points donné par λ_k



La **qualité de représentation** de l'individu i à l'axe k s'écrit :

$$Qlt_{ik} = \cos^2(\theta_{ik}) = \frac{c_{ik}^2}{\|P_i\|^2}$$



Avec :

- c_{ik} la coordonnée de i selon k
- θ_{ik} l'angle entre le vecteur P_i et l'axe k
- $\|P_i\|$ la norme du vecteur l'individu i

On peut intégrer de nouvelles variables et individus soit dans le calcul de l'ACP, ce qui modifie l'espace d'arrivée , soit **a posteriori**.

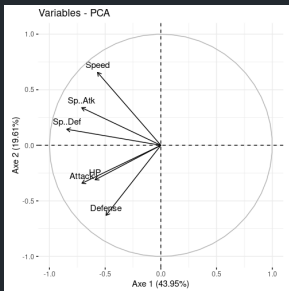
Bilan

Avantages

- Réduit la dimensionnalité
- Regroupe les variables et les individus
- montre l'effet conjoint des variables

Limites

- Composantes difficiles à interpréter en elles-mêmes
- hypothèses fortes : la variance est un mélange "linéaire", et la variance est de l'information, pas du bruit (\approx RSB fort)
- Que faire si p est grand et si les premières composantes capturent peu d'inertie ?



- L'Axe 1 "prend tout" : c'est la puissance générale des pokémon, une sorte de **score global**
- L'Axe 2 sépare les variables en **deux groupes** : celle du combat "standard" (Attack, Defense, HP) et celles du combat "spécial/rapide" (Sp. .Atk, SP. .Def, Speed)
- On pourrait être tenté de diviser les pokemons en "Costauds classiques" vs. "Ninjas spéciaux" .

Merci à Anh Le , <https://anhqle.github.io/gotta-plot-them-all/>

La notion d'**inertie** est très utile en classification : observer la chute d'inertie intra-classe indique souvent le nombre optimal de classes ! (cf CAH)

La **malédiction de la dimensionnalité** (curse of dimensionality) peut nuire dans beaucoup de traitements numériques . Elle peut (parfois) être contournée, en appliquant une ACP !

<http://www.sthda.com/french/articles/38-methodes-des-composantes-principales-dans-r-guide-pratique-73-acp-analyse-en-composantes-principales-avec-r-l-essentiel>

- This is important

- This is important
- Now this

- This is important
- Now this
- And now this

- This is really important
- Now this
- And now this

Mono message sur une diapo