Data exploration
Analyse en Composantes Principales

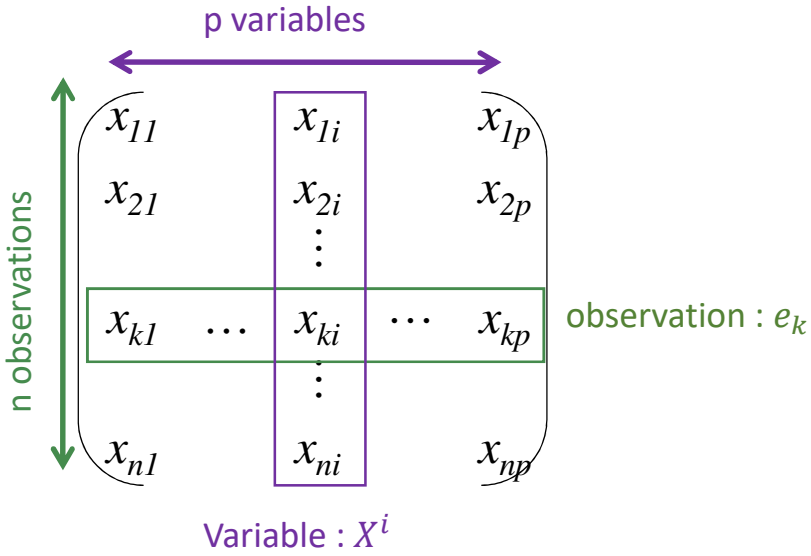
Observer simultanément des individus d'une population sur p>2 variables

- Etudier le lien entre les variables
- Faire une représentation graphique d'un nuage de points à p dimensions
- Qualifier les observations du jeu de donnée

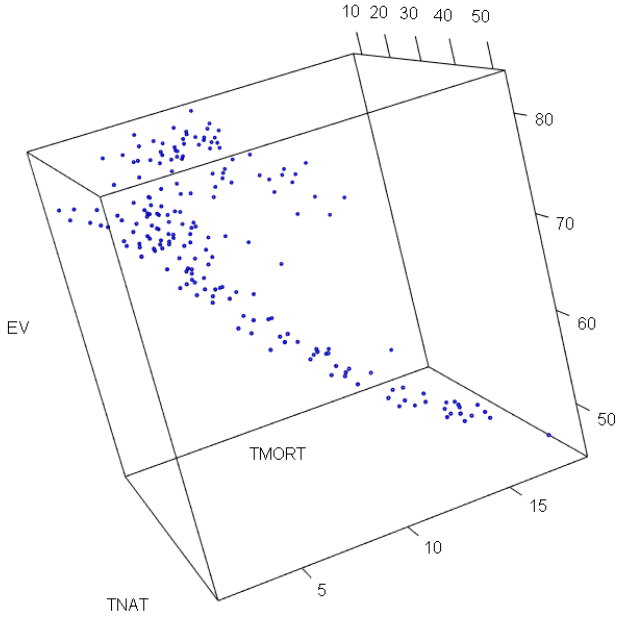
ACP

Nuage de points en dimension p

Un jeu de données est un tableau avec en ligne les observations et en colonne les variables $X_1, \dots, X_p$. On peut donc représenter chaque ligne du tableau comme un point dont les coordonnées sont les valeurs prises par les variables.



Sur cet exemple chaque point est un pays caractérisé par son espérance de vie, et ses taux de natalité et de mortalité.



Si p>3, il est impossible de visualiser le nuage de points. L'objectif de l'ACP est de trouver une projection du nuage de points en dimension 2 ou 3 de façon à perdre le moins possible d'information.

- Qu'est-ce que l'information?
- Si projection alors produit scalaire?
- Quel lien avec les variables $X_1, \dots, X_p$?

Figure J.P. Fenelon

ACP

Comment mesurer l'information?

Centre de gravité

Le centre de gravité est le point dont les coordonnées sont définies par les valeurs moyennes des variables,

$$G = (\bar{X}_1, \dots, \bar{X}_p)$$

Inertie

L'information contenue dans un nuage de points correspond à l'inertie de celui-ci, c.-à-d. la somme des distances au carré entre les observations et le centre de gravité du nuage,

$$I = \sum_{k=1}^{n} \|e_k - G\|^2$$

où $\|.\|$ désigne la norme euclidienne. L' inetrie mesure la dispersion totale du nuage de points.

Propriétés de l'inertie

L'inertie peut s'exprimer comme la trace de la matrice de variance-covariance, c.-à-d. la somme des variances des variables,

$$I = tr(V) = \sum_{k=1}^{p} s_k^2 \quad \text{où} \quad V = \begin{pmatrix} s_1^2 & \cdots & c_{X_1 X_p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{X_1 X_p} & \cdots & s_p^2 \end{pmatrix}.$$

La matrice de variance-covariance est symétrique définie positive.

L'inertie peut aussi s'écrire comme la somme des valeurs propres de V,

$$I = \lambda_1 + \cdots + \lambda_p$$

ACP
Centrer et réduire les variables

L'analyse en composantes principales nécessite de calculer des distances entre observations,

$$\|e_k - e_{k'}\|^2 = \sum_{i=1}^{p}(x_{ki} - x_{k'i})^2.$$

Si les variables n'ont pas le même ordre de grandeur, certaines variables à valeurs faibles « disparaitrons » de l'information au profit de celles ayant de fortes valeurs.

	Pop. (milliers)	Taux nat. (pour mille)	Esp. vie	Nb. enfants
Argentine	41050	16,87	75,87	2,19
Arménie	3099	15,47	74,44	1,77
Australie	21731	12,56	81,99	1,85
Autriche	8407	9,01	80,55	1,40

distance entre l'Argentine et l'Arménie

(41050-3099)²+(16,87-15,47)²+(75,87-74,44)²+(2,19-1,77)²=**1440278405**

(41050-3099)² =1440278401

Les variables Taux nat., Esp. vie et Nb. enfants ne comptent pas dans le calcul de la distance

De la même façon la quantification de l'information au travers de l'inertie, $I = \sum_{i=1}^{p} s_i^2$, privilégie les variables fortement dispersés.

Il est donc important de centrer et réduire les variables

$$X_i \leftarrow \frac{X_i - \bar{X}_i}{s_i}, \mathrm{i} = 1, \ldots, \mathrm{p}$$

ACP

Quel produit scalaire?

Le produit scalaire entre deux variables X_i et X_j est défini par,

$$< X_i , X_j > = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_{ki}x_{kj} ,$$

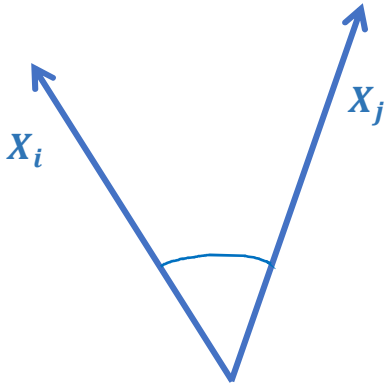
d'où la norme

$$\|X_i\|^2 = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} (x_{ki})^2$$

Si les variables sont centrées alors $< X_i , X_j > = c_{X_iX_j}$ et $\|X_i\|^2 = s_i^2$

D'après la formule du cosinus,

$$\cos(\widehat{X_i, X_j}) = \frac{< X_i , X_j >}{\|X_i\|\|X_j\|} = \frac{c_{X_iX_j}}{s_i \ s_j} = r_{X_iX_j}$$



- $|r_{X_iX_j}|$=1 ⇔ les variables sont colinéaires
  - corrélées positivement si $r_{X_iX_j}$=1
  - corrélées négativement si $r_{X_iX_j}$=-1
- $r_{X_iX_j}$ = 0 ⇔ les variables sont orthogonales
  - ⇔ les variables ne sont pas linéairement corrélées

ACP
Principe de l'ACP

Le principe de l'ACP est de trouver des espaces de petites dimensions sur lesquels les projections des observations minimisent la déformation de la réalité.

On cherche donc un sous-espace F_q de $\mathbb{R}^p$ de dimension q (q=2,3,..) sur lequel projeté le nuage de points. Les axes de ce sous-espace sont des combinaisons linéaires des axes d'origine (c.-à-d. les variables). Les nouveaux axes s'appellent les *composantes principales*.

<u>Principe</u>

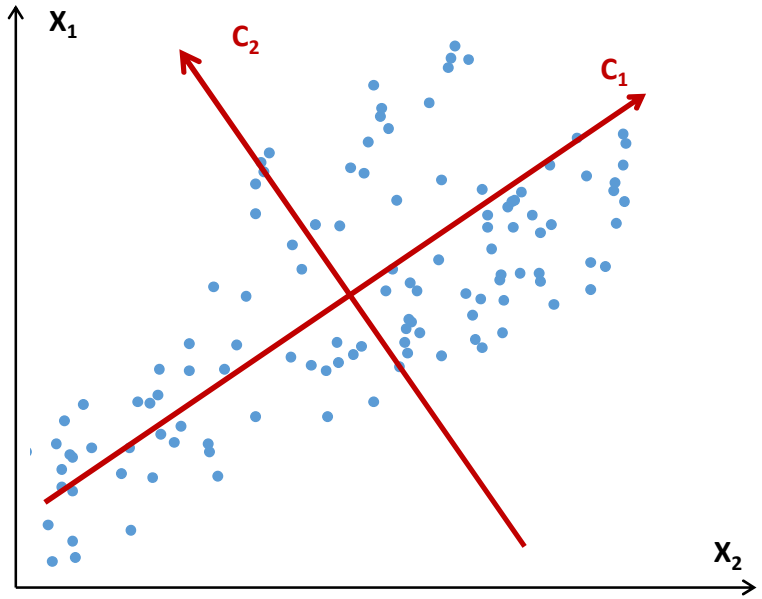
• La 1ère composante principale (C_1) doit « capturer » le maximum d'information

Il reste un résidu d'information non expliquée

• La 2ème composante principale (C_2) est calculée sur ce résidu telle que

- ✓ Elle capture un maximum d'information
- ✓ Elle soit non corrélée linéairement à C_1 (orthogonalité)

• Sur le même principe, calcul de C_3, C_4, …,C_p



Il s'agit d'un changement de repère pour passer du repère initial formé par les variables à un repère orthogonale tel que les nouveaux axes sont ordonnés par quantité d'information décroissante.

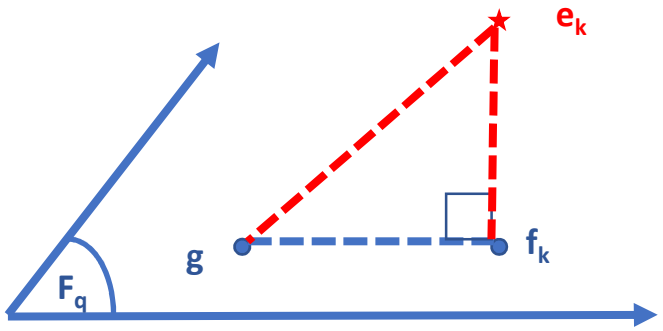
Nb. composantes principales = Nb. variables initiales

ACP

Comment perdre le moins d'information possible?

Soit e_k un point du nuage et notons f_k sa projection orthogonale sur le sous-espace F_q.
On cherche F_q tel que la distance entre F_q et les individus soit minimale.

Minimiser : $\sum_{k=1}^{n} \|f_k - e_k\|^2$



D'après Pythagore,

$$\|f_k - e_k\|^2 = \|g - e_k\|^2 - \|f_k - g\|^2$$

Donc le problème revient à maximiser

$$\sum_{k=1}^{n} \|f_k - g\|^2$$ car $\|g - e_k\|^2$ ne dépend pas de F_q

autrement dit maximiser l'inertie du nuage projeté. On cherche à garder un maximum de dispersion dans la projection.

ACP
Solution du problème

Le sous-espace qui minimise l'inertie du nuage projeté est définir par :

$$F_q = \text{vect}(u_1, \dots, u_q)$$

où u_k est le **vecteur propre** unitaire de la matrice de variance-covariance V associée à la k^{ème} plus grande valeur propre.

- ✓ L'inertie du nuage projeté sur u_k est λ_k
- ✓ L'inertie du nuage projeté sur F_q est λ_1+…+λ_q
- ✓ L'inertie totale est I=λ_1+…+λ_q

Les vecteurs propres sont appelés les *axes principaux*

- ✓ Le premier axe principal u_1 est associé à la plus grande valeur propre λ_1
- ✓ Le deuxième axe principal u_2 est associé à la deuxième valeur propre λ_2
- ✓ Etc…

L'ACP est un changement de repère dans lequel les 1ers axes contiennent un maximum d'information

La projection des individus sur un axe principal est une nouvelle variable appelée *composante principale*

- ✓ La première composante c_1 représente les coordonnées des projections des individus sur l'axe u_1
- ✓ La deuxième composante c_2 représente les coordonnées des projections des individus sur l'axe u_2
- ✓ Etc…

ACP

Combien d'axes retient-on?

Il y a deux règles pour le choix du nombre d'axes :

- garder un maximum d'information contenu dans ces axes (pourcentage cumulé d'inertie)
- couper sur le dernier grand saut d'information entre les axes (elbow rule)

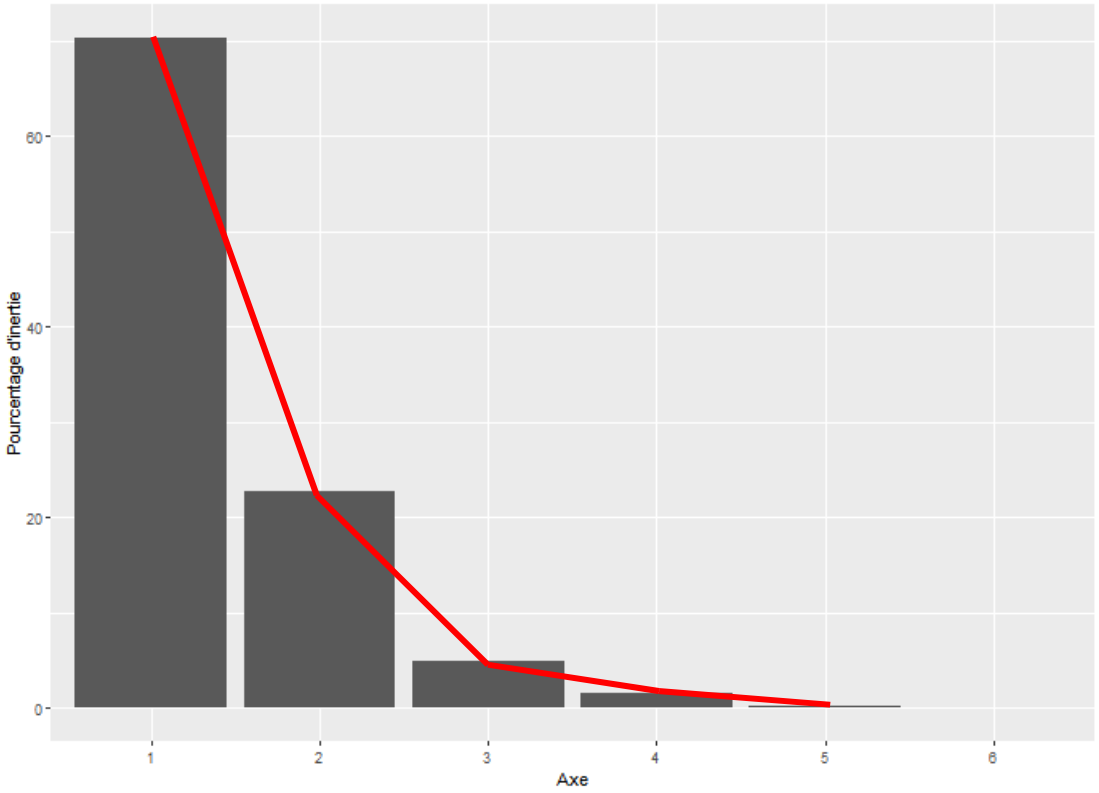
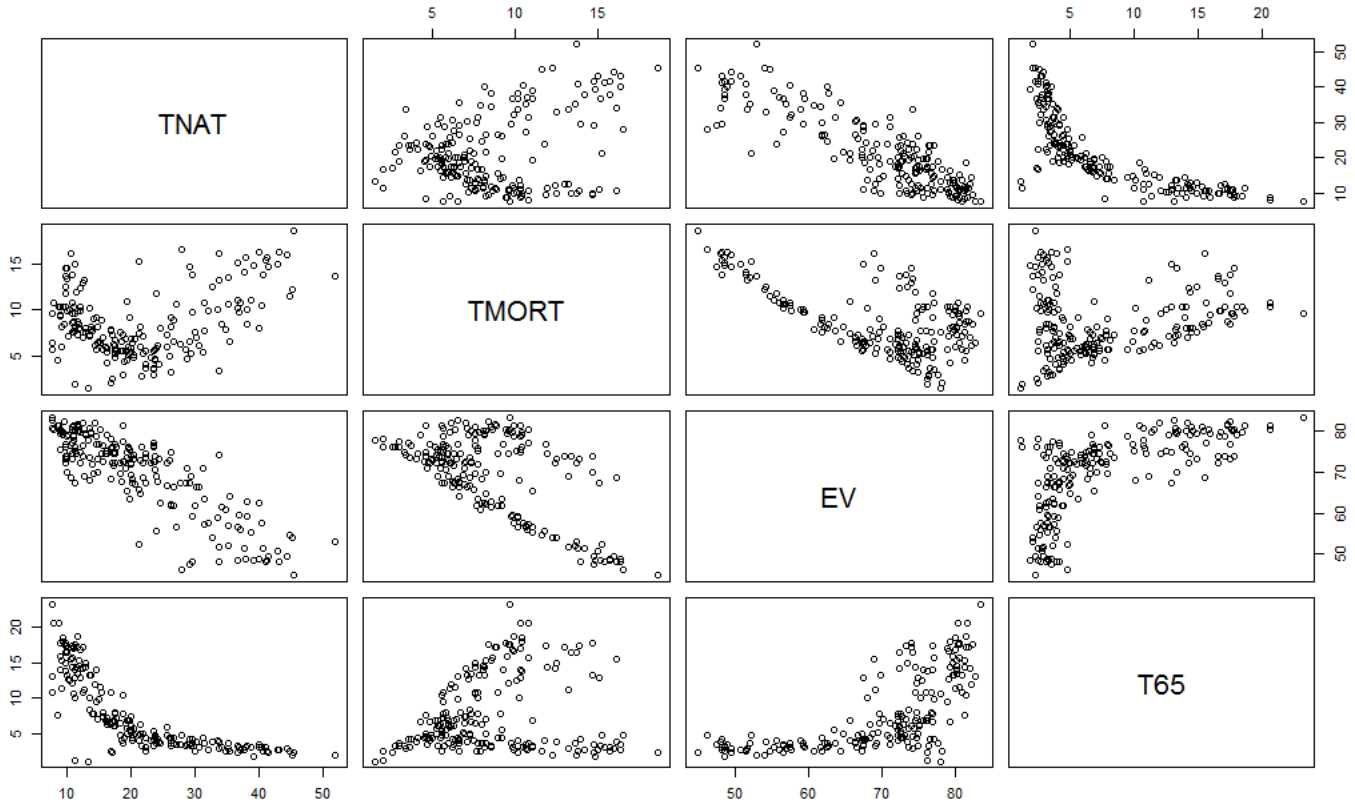


Tableau des valeurs propres

Axe	%	Cum. %
1	70.3	70.3
2	22.8	93.1
3	4.9	98.0
4	1.6	99.6
5	0.2	99.8
6	0.2	100.0

ACP

Exemple de la démographie mondiale



Pays caractérisés par 4 variables :

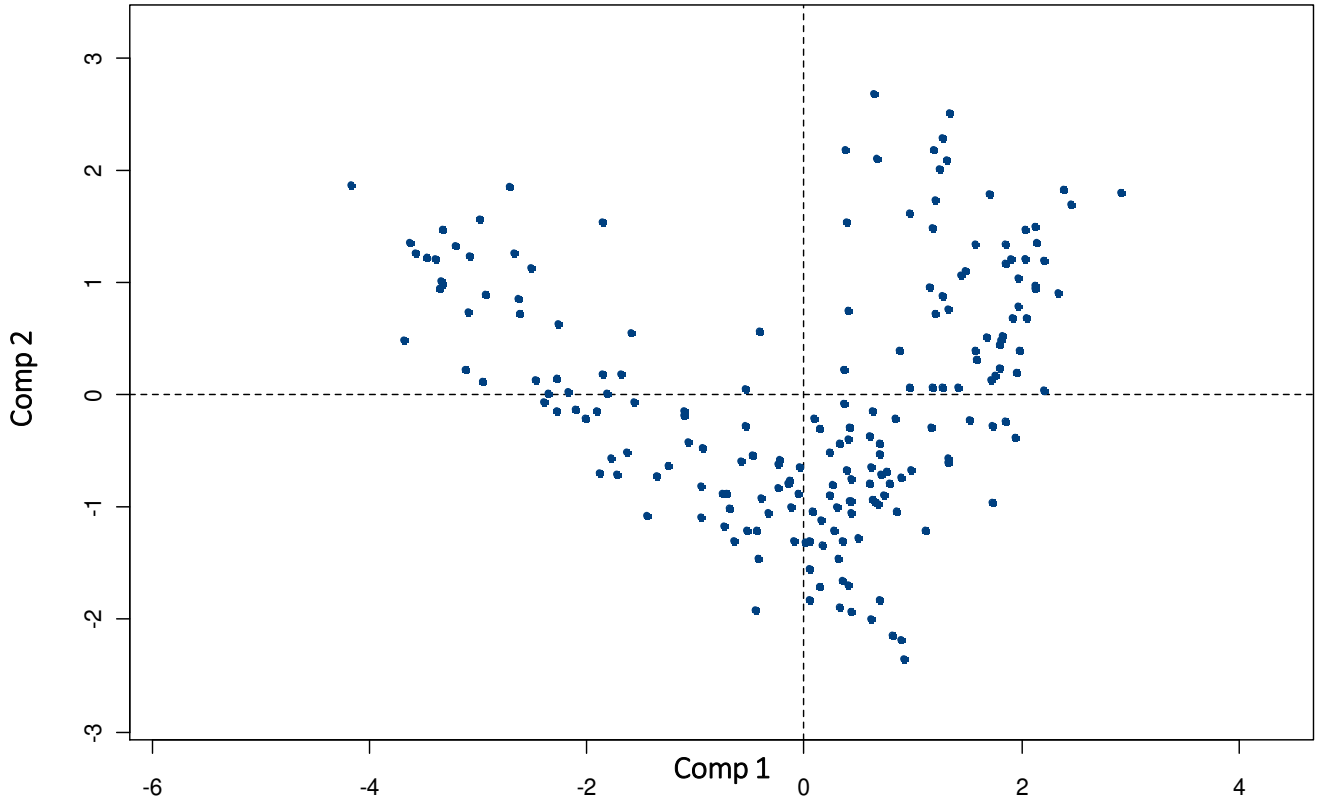
- TNAT : Taux de natalité
- TMORT : Taux de mortalité
- EV : Espérance de vie
- T65 : Taux >65 ans

ACP

Représentation des observations

	eigenvalue	percentage of variance	cumulative % of variance
comp 1	2.66302177	66.5755442	66.57554
comp 2	1.19799267	29.9498168	96.52536
comp 3	0.12720887	3.1802217	99.70558
comp 4	0.01177669	0.2944172	100.00000

4 variables
(TNAT, TMORT, EV, T65)
⇔
4 composantes principales
(combinaisons linaires des 4 variables initiales)



La 1ère composante principale contient 66,6% de l'inertie.

La 2ème composante principale contient 29,9% de l'inertie.

La représentation des pays sur le plan principal retranscrit 96,5% de l'information.

Comment interpréter ce graphique?

Comment qualifier un pays en haut à droite par exemple?

ACP

Représentation des variables

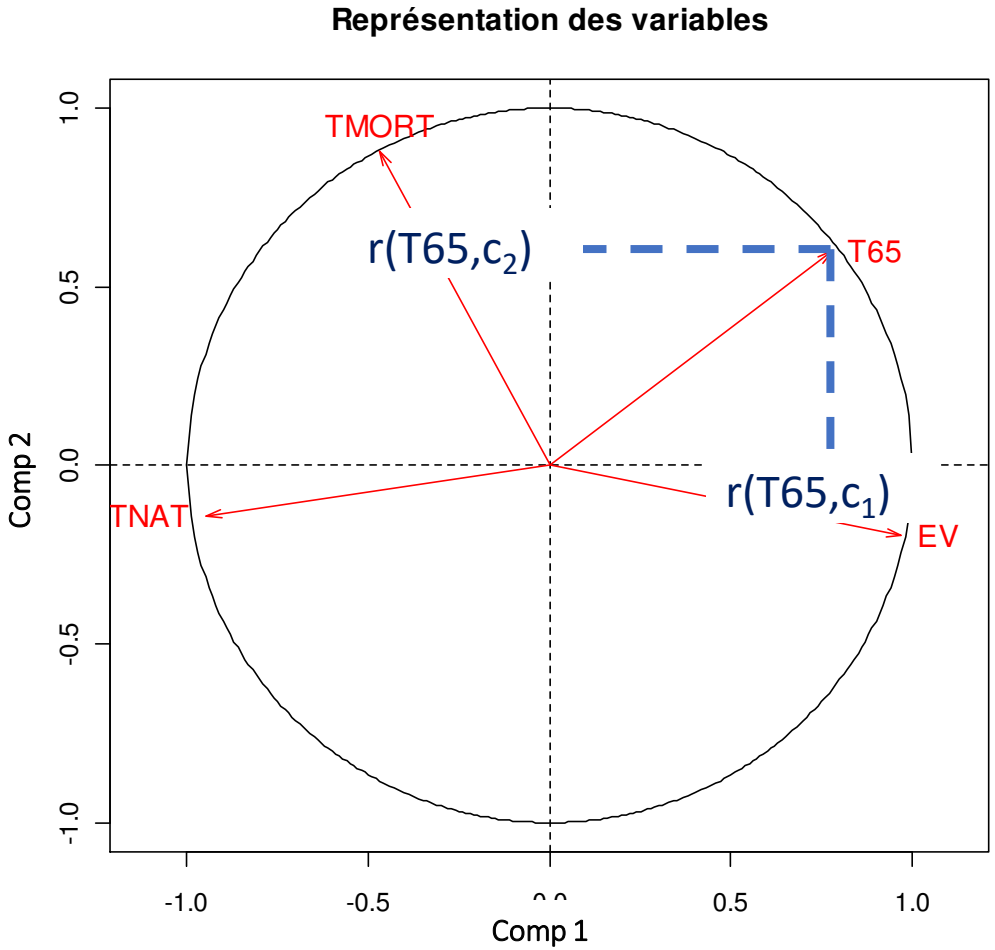
$cor = coordonnée=corrélation

$cos2= répartition de la variable sur les 4 axes principaux

La variable TNAT est représentée à 89.82% sur C_1 et 1.98% sur C_2 etc..

$contrib = contribution de la variable à la construction de l'axe

La variable TMORT ne contribue pas (8%) à la construction de c_1.



$cor

	Dim.1	Dim.2	Dim.3	Dim.4
TNAT	-0.9477642	-0.1409135	...	
TMORT	-0.4674138	0.8814408		
EV	0.9692397	-0.1966503		
T65	0.7790144	0.6021020		

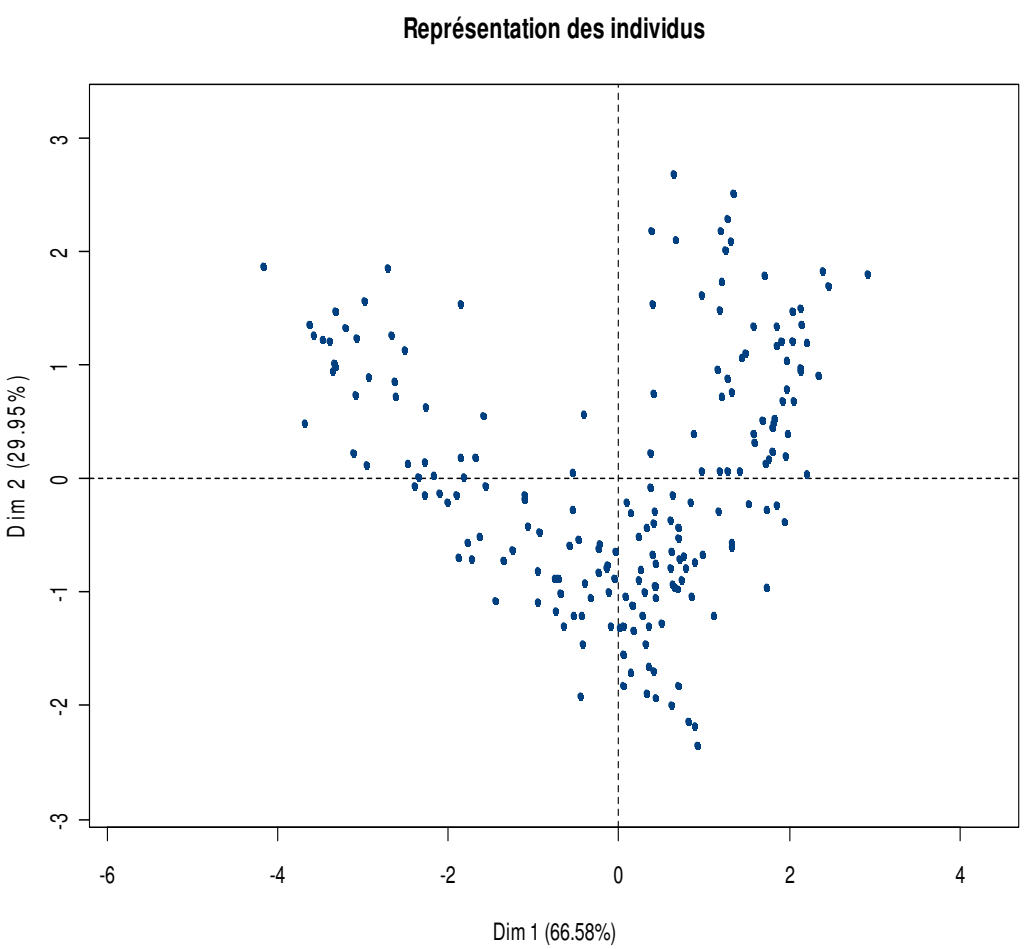
$cos2

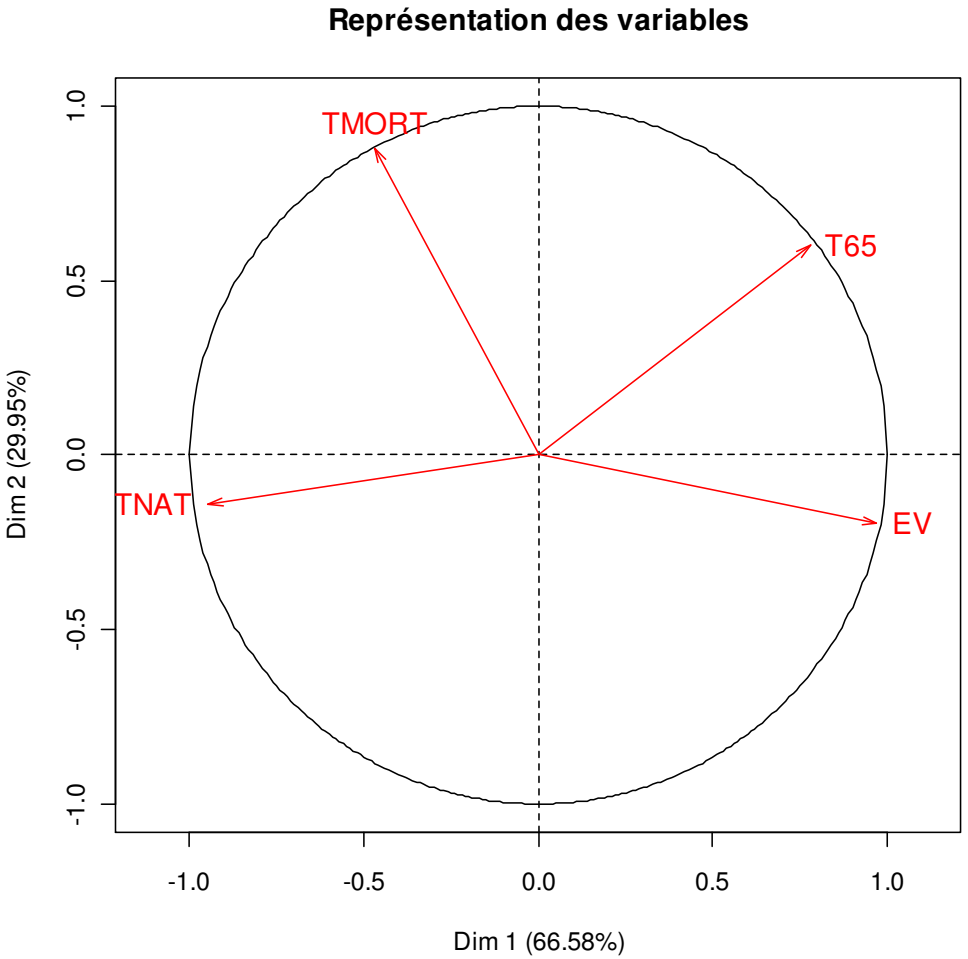
	Dim.1	Dim.2
TNAT	0.8982571	0.01985663
TMORT	0.2184757	0.77693792
EV	0.9394256	0.03867136
T65	0.6068634	0.36252677

$contrib

	Dim.1	Dim.2
TNAT	33.73074	1.657492
TMORT	8.20405	64.853311
EV	35.27668	3.228013
T65	22.78853	30.261184

ACP
Interprétation





- TNAT et EV sont corrélés négativement
  les pays avec un fort taux de natalité ont une espérance de vie courte
- TMORT et T65 sont non corrélés

ACP
Validité des représentations graphiques

- La projection perd le moins d'information possible

⇒ *vérifier le % d'inertie expliquée pas l'axe*
⇒ *conserver le nombre d'axes nécessaire pour avoir une inertie expliquée correcte*

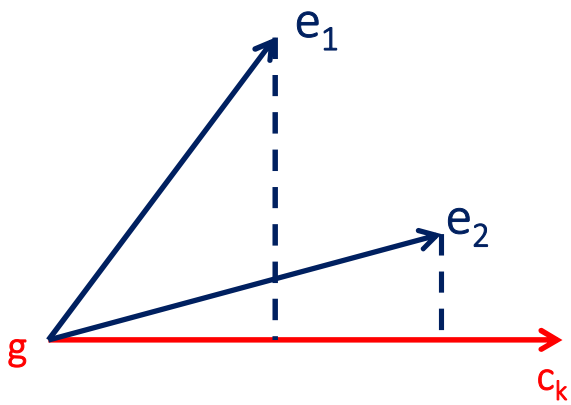
Autre utilisation de l'ACP = réduire la dimension d'un problème
L'ACP est très souvent utilisée en amont de méthodes de *machine learning* pour réduire le nombre de variables. L'objectif n'est plus l'interprétation des données sur un graphique.

- Les variables sont bien représentées si elles sont proches du cercle. A contrario celles qui sont proches de l'origine sont peu corrélées avec les axes

⇒ *pas d'interprétation possible pour ces variables*

- Les individus sont bien représentés s'ils ne sont pas trop éloignés de l'axe sur lequel on les projette

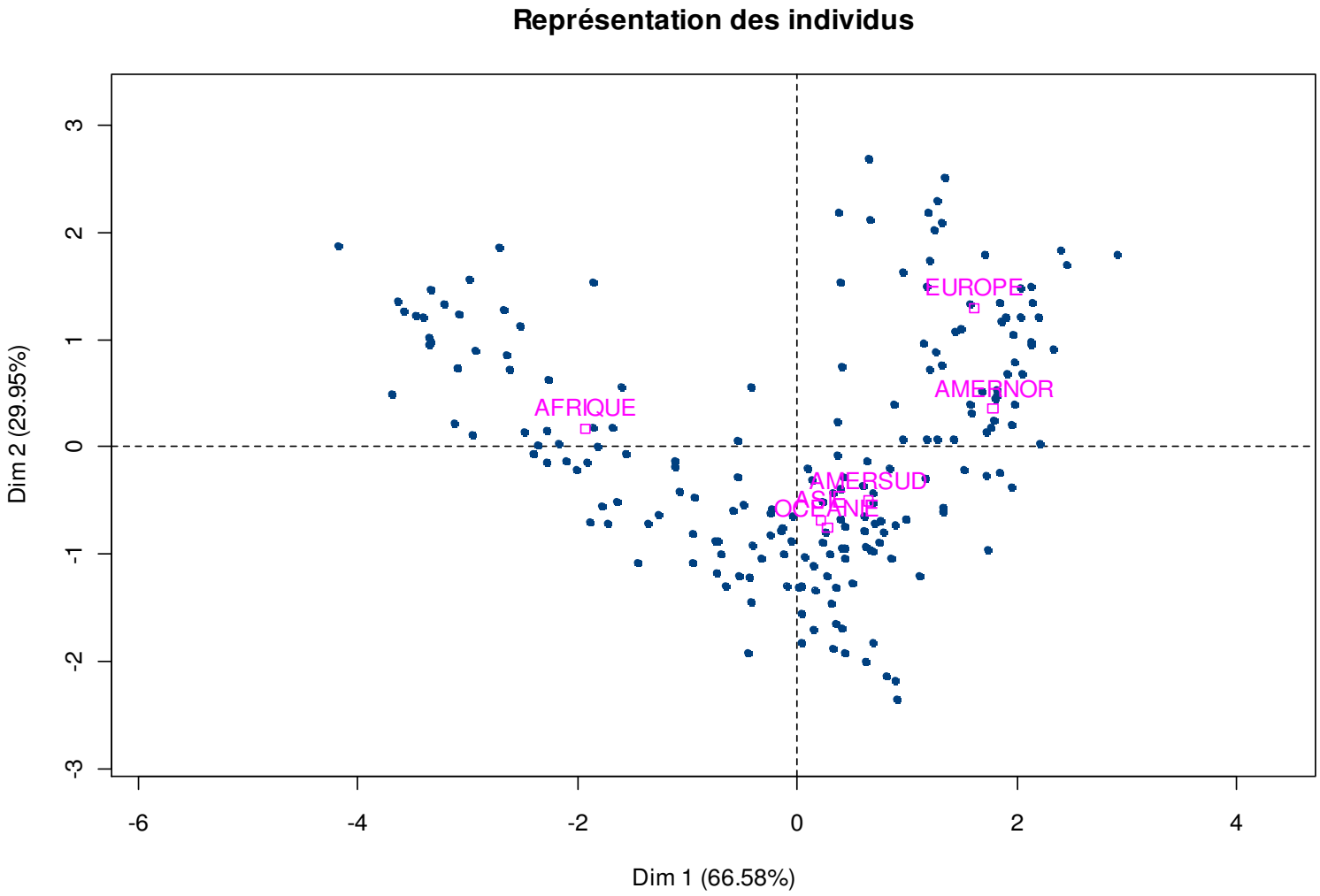
⇒ *vérifier le cosinus entre l'individu et l'axe (proche de 1)*
⇒ *valable si l'individu loin du centre de gravité*



ACP

Ajout de variable ou d'observation

Il est possible d'ajouter des individus ou des variables aux représentations graphiques.
Ceux-ci ne participent pas à la construction des axes

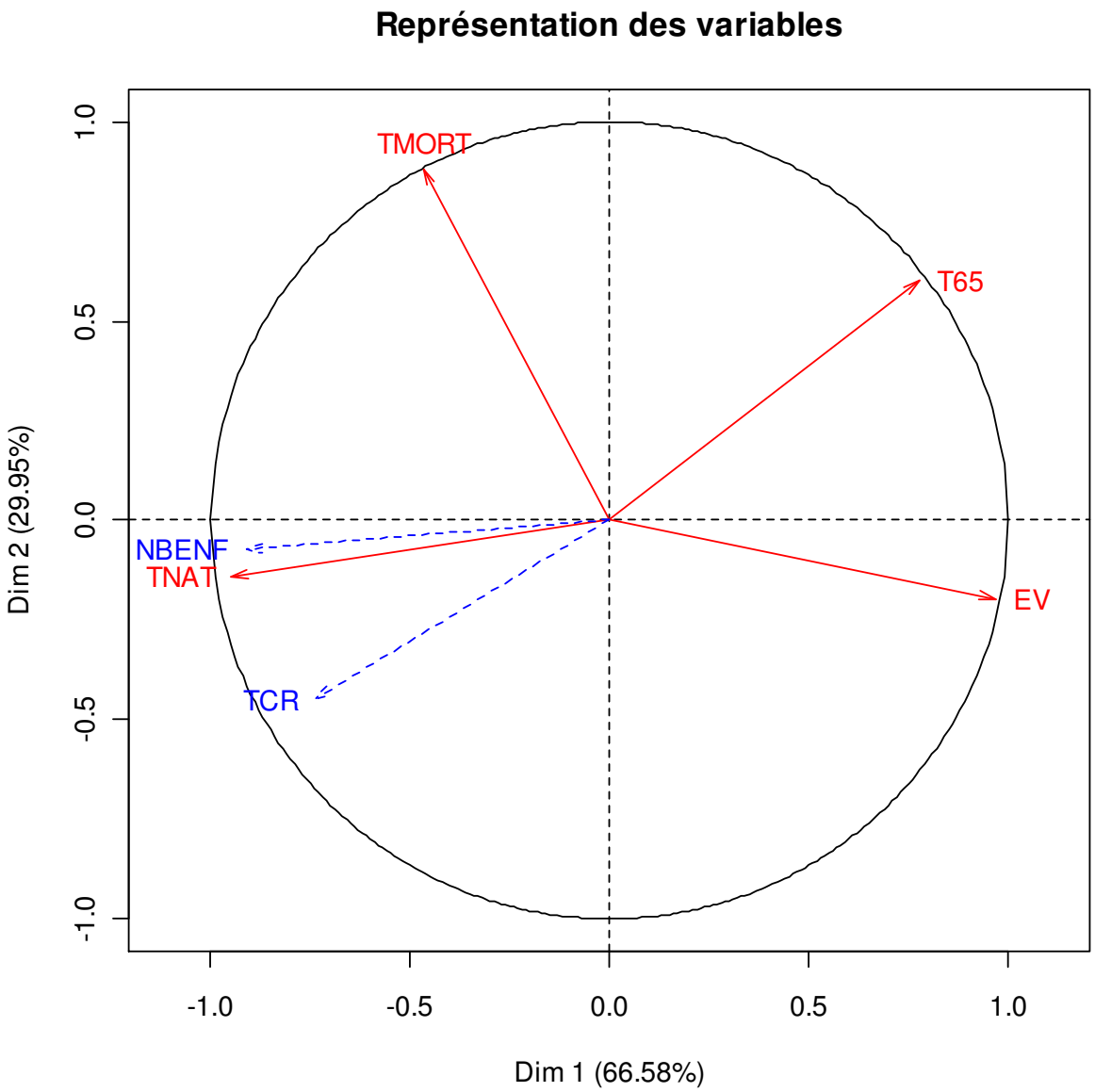


Ajout d'une variable qualitative

une modalité = un nouveau point qui est le centre de gravité des individus présentant cette modalité

ACP

Ajout de variable ou d'observation

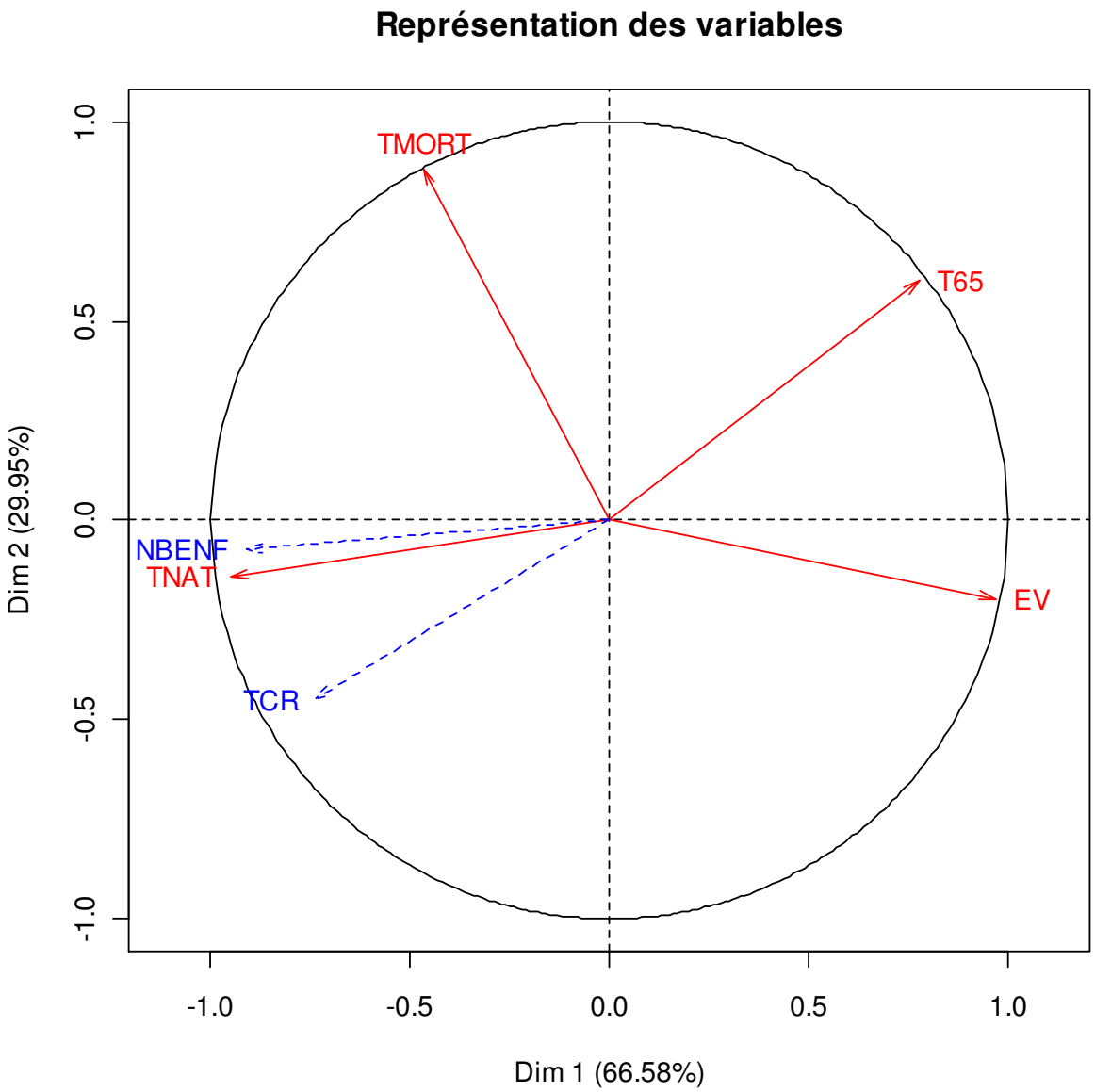


Ajout des variables nombre d'enfants par femme et taux de croissance.

Cet ajout n'a pas modifié le calcul des composantes principales. Il s'agit juste d'une projection des variables dans le cercle de corrélation.

ACP

Ajout de variable ou d'observation



Ajout des variables nombre d'enfants par femme et taux de croissance.

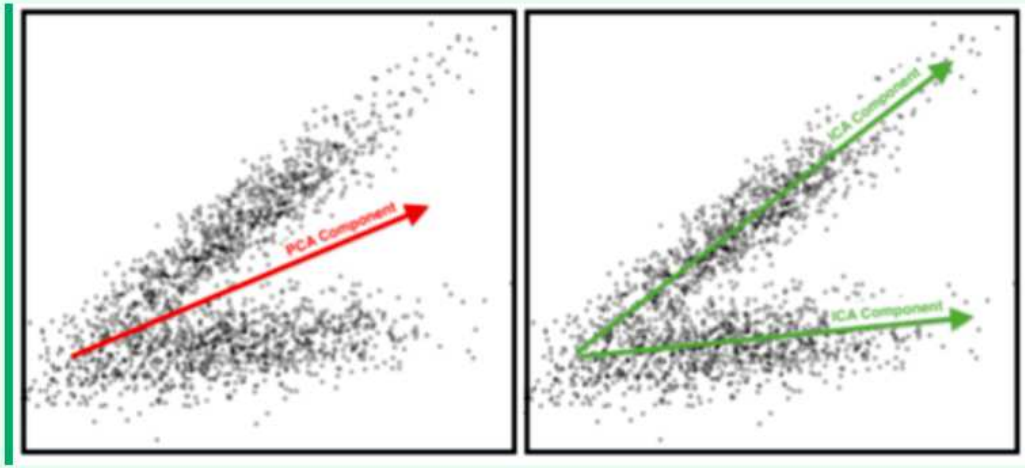
Cet ajout n'a pas modifié le calcul des composantes principales. Il s'agit juste d'une projection des variables dans le cercle de corrélation.

ACP
Alternatives à l'ACP

Analyse en composantes principales indépendants
Analyse en composantes principales par noyaux

Extensions of PCA

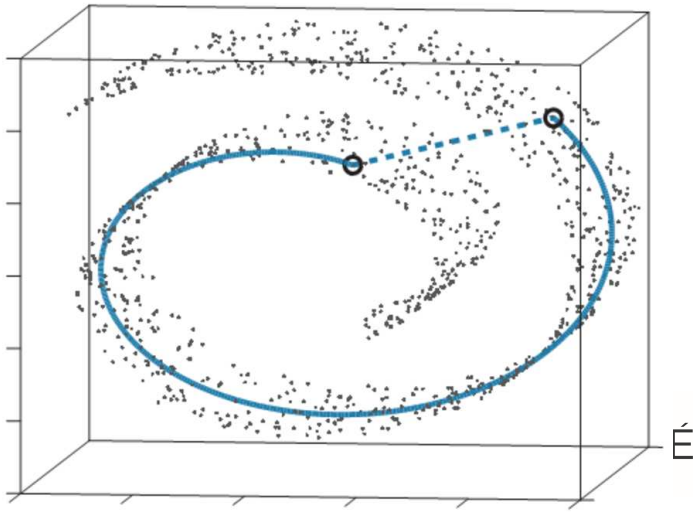
In some cases the orthogonality of the principal components prevent it from extracting informative features. For these cases **independent component analysis** (ICA) is a better choice. An examples case where ICA works much better than PCA is illustrated below.



Finally, PCA works better on data with linear relationships. For non-linear transformation, Kernel PCA can be applied for better results. This link ☐ shows an

https://www.commonlounge.com/discussion/9bcc188644cd4bc9b7542dab93fa8bd7/history

L'algorithme **t-SNE (t-distributed stochastic neighbor embedding**) est une technique de réduction de dimension pour la visualisation de données . Il s'agit d'une méthode **non linéaire** (contrairement à l'ACP) permettant de représenter un ensemble de points d'un espace à grande dimension dans un espace de deux ou trois dimensions, les données peuvent ensuite être visualisées avec un nuage de points. L'algorithme t-SNE tente de trouver une configuration optimale pour respecter les proximités entre points : deux points qui sont proches (resp. éloignés) dans l'espace d'origine devront être proches (resp. éloignés) dans l'espace de faible dimension.



https://openclassrooms.com/fr/courses/4379436