Analyse en Composantes Principales

Vincent Nozick

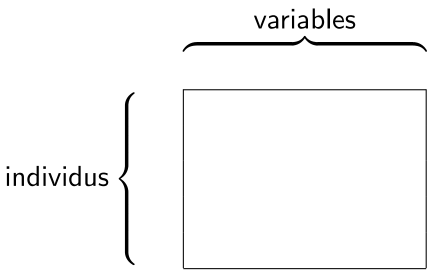
Analyse en Composantes Principales

Introduction :
Méthode qui permet d'identifier les corrélations entre des variables.

En anglais : Principal Component Analysis (PCA)

Analyse en Composantes Principales

Plus précisément :
L'ACP traite un tableau d'individus $\times$ variables.



Exemples

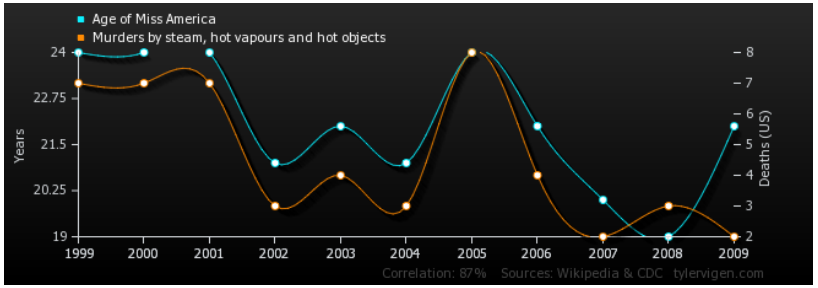
individus	vins	notes examen	salaire
variables	fruité charpenté capiteux gouleyant	qté de travail pointure aime chocolat	années d'études expérience pro homme / femme

Les enjeux :

- évaluer les ressemblances entre **individus**.
- résumer l'ensemble des **variables** par un petit nombre de variables synthétiques (les composantes principales) représentant un groupe de variables liées entres elles.
- trier les composantes principales par ordre d'impact.
  $\rightarrow$ permet d'éliminer les variables non pertinentes.

Limitations

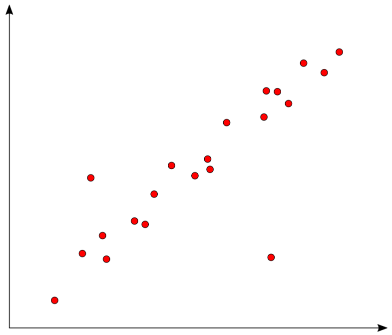
Âge de Miss America
corrélé avec
Meurtres par vapeurs et objets chauds



spurrious correlations : http://tylervigen.com/

Une corrélation n'implique pas de relation de cause à effet.

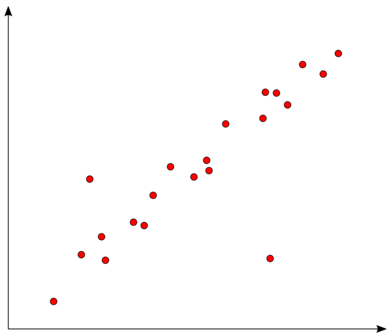
Exemple 2D



$$\mathtt{A} = \begin{bmatrix} 12 & 14 \\ 5 & 8 \\ 8 & 7 \\ 20 & 11 \\ \cdots & \cdots \\ 14 & 16 \\ 7 & 10 \\ 22 & 15 \end{bmatrix}$$

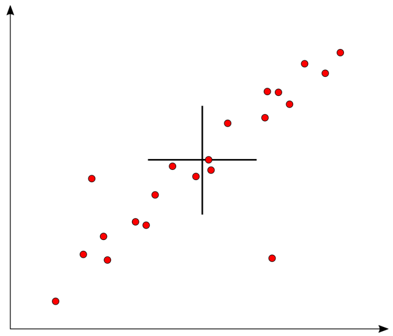
individus = points
variables = 2 coordonnées

Centrer les données



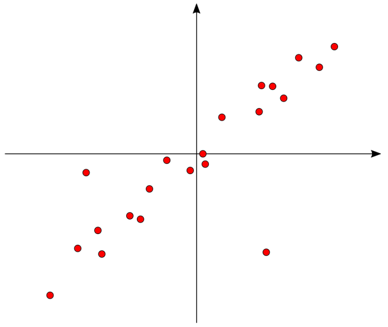
données de départ

Centrer les données



calcul des moyennes $\langle \mathtt{A}_{i\bullet} \rangle$ pour chaque variable i

Centrer les données



centrer les données : $\mathtt{A}_{ij} \leftarrow \mathtt{A}_{ij} - \langle \mathtt{A}_{i\bullet} \rangle$

Covariance

Définition : $\mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \dfrac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \langle \mathbf{x} \rangle)(y_i - \langle \mathbf{y} \rangle)}{n-1}$

Corrélation entre 2 axes :

- $\mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) > 0$: les 2 dimensions varient conformément
- $\mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) < 0$: les 2 dimensions varient de façon contraire
- $\mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 0$: les 2 dimensions sont indépendantes

Notes :

- $\mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathsf{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{x})$
- $\mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{x}) =$ variance de $\mathbf{x}$

Matrice de covariance

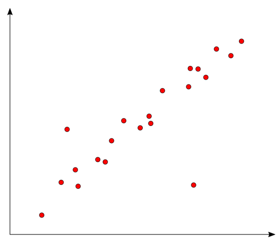
Qui varie avec qui ?

$$\mathtt{C} = \begin{bmatrix} \mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{x}) & \mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{y}) & \mathsf{Cov}(\mathbf{x},\mathbf{z}) \\ \bullet & \mathsf{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{y}) & \mathsf{Cov}(\mathbf{y},\mathbf{z}) \\ \bullet & \bullet & \mathsf{Cov}(\mathbf{z},\mathbf{z}) \end{bmatrix}$$

Pour nos données : $\mathtt{C} = \dfrac{\mathtt{A}_{mn}^{\top}\mathtt{A}_{nm}}{n-1}$

Note : La matrice $\mathtt{C}$ est symétrique.

Matrice de covariance



$$\mathtt{A} = \left.\begin{bmatrix} 12 & 14 \\ 5 & 8 \\ 8 & 7 \\ 20 & 11 \\ \dots & \dots \\ 14 & 16 \\ 7 & 10 \\ 22 & 15 \end{bmatrix}\right\} n$$

$$\mathtt{C} = \frac{\mathtt{A}^{\top}\mathtt{A}}{n-1} = \begin{bmatrix} 0.6165 & 0.6154 \\ 0.6154 & 0.7165 \end{bmatrix}$$

Vecteurs propres et valeurs propres

$$\mathtt{C} = \begin{bmatrix} 0.6165 & 0.6154 \\ 0.6154 & 0.7165 \end{bmatrix}$$

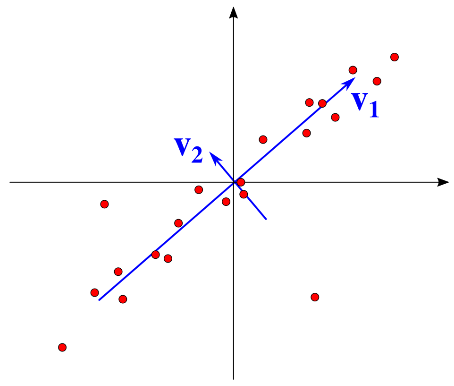
Méthode :
Quels sont les “axes forts” de cette matrice?
$\rightarrow$ vecteurs propres et valeurs propres.

Vecteurs propres et valeurs propres :

$$\lambda_1 = 1.2844 \qquad \mathbf{v}_1 = (-0.678, -0.735)^\top$$
$$\lambda_2 = 0.049 \qquad \mathbf{v}_2 = (-0.735, 0.678)^\top$$

vecteurs normés et orthogonaux entre eux.

Vecteurs propres et valeurs propres



$$\lambda_1 = 1.2844 \qquad \mathbf{v}_1 = (-0.678, -0.735)^\top$$
$$\lambda_2 = 0.049 \qquad \mathbf{v}_2 = (-0.735, 0.678)^\top$$

Vecteurs propres et valeurs propres

Un nouvel espace : $\quad \mathtt{C} = \mathtt{PDP}^{-1} = \mathtt{PDP}^\top$

Vecteurs propres :

$$\mathtt{P}^\top = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \end{bmatrix}$$

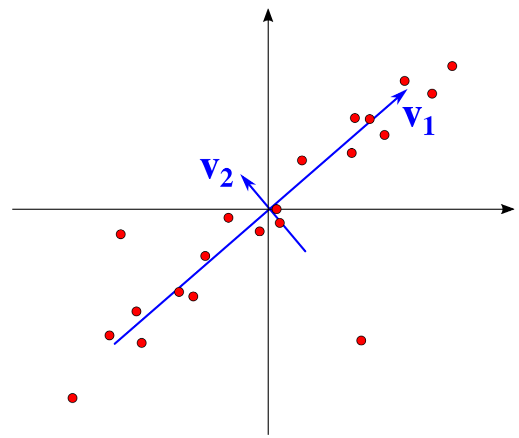
les vecteurs sont triés par valeur propres décroissante.

La transformation pour aller dans cet espace :

$$\mathtt{A}'^\top = \mathtt{P}^\top \mathtt{A}^\top \qquad \mathbf{x}' = \mathtt{P}^\top \mathbf{x}$$

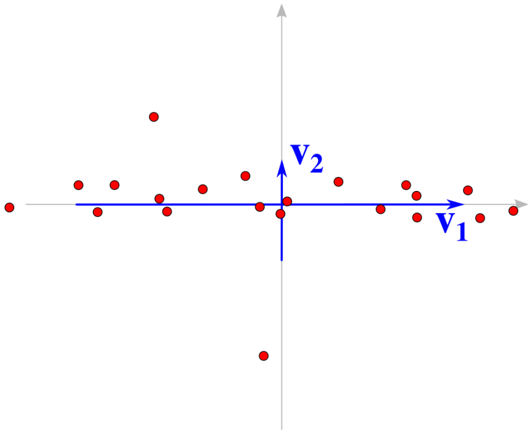
Note : $\mathtt{P}^\top$ est une matrice de rotation.

Transformation



$$\mathtt{A}'^\top = \mathtt{P}^\top \mathtt{A}^\top$$

Transformation



$$\mathtt{A}'^{\top} = \mathtt{P}^{\top}\mathtt{A}^{\top}$$

Transformation

Pour chaque donnée :

$$\mathbf{x}' = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^{\top} \\ \mathbf{v}_2^{\top} \end{bmatrix} \mathbf{x}$$

soit

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données

Réduction de $\mathtt{P}^{\top}$:
On peut supprimer les vecteurs propres associés aux valeurs propres les plus faibles. On ne garde que les composantes principales représentant les variables les plus corrélés (les plus représentatifs) parmi les données.

Introduction Méthode Exemple Résumé Applications

Simplification des données

Réduction de $\mathtt{P}^{\top}$:
On peut supprimer les vecteurs propres associés aux valeurs propres les plus faibles. On ne garde que les composantes principales représentant les variables les plus corrélés (les plus représentatifs) parmi les données.

$$\mathtt{P}^{\top} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix}$$

Simplification des données

Réduction de $\mathtt{P}^\top$:
On peut supprimer les vecteurs propres associés aux valeurs propres les plus faibles. On ne garde que les composantes principales représentant les variables les plus corrélés (les plus représentatifs) parmi les données.

$$\mathtt{P}^\top = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ -0.735 & 0.678 \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \mathtt{P'}^\top = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Simplification des données

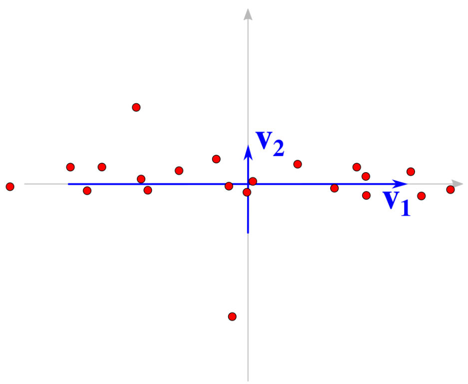
Projection :

$$\mathbf{x}' = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{0}^\top \end{bmatrix} \mathbf{x}$$

soit

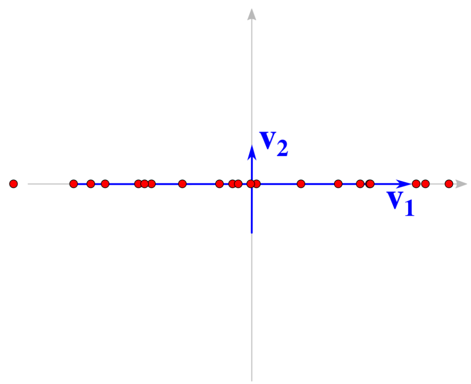
$$\begin{pmatrix} x' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données



$$\begin{pmatrix} x' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données



$$\begin{pmatrix} x' \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -0.678 & -0.735 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Simplification des données

Projection :

$$\mathbf{x}' = \mathrm{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

$\rightarrow$ on ne garde dans $\mathbf{x}'$ que les k premières composantes, celles qui ont vraiment une signification.

$\rightarrow$ chacune de ces composantes regroupe un ensemble de variables corrélées.

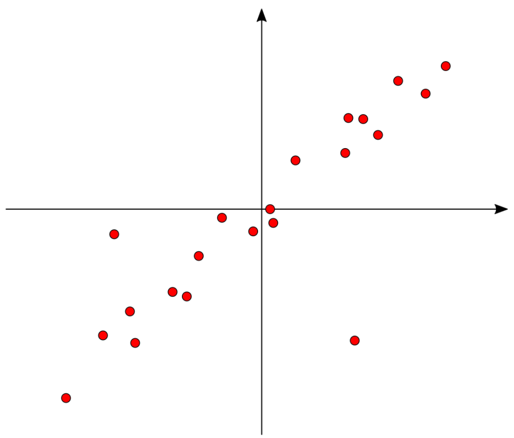
Simplification des données

Reprojection :
la transformation

$$\mathbf{x}' = \mathrm{P}\mathrm{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

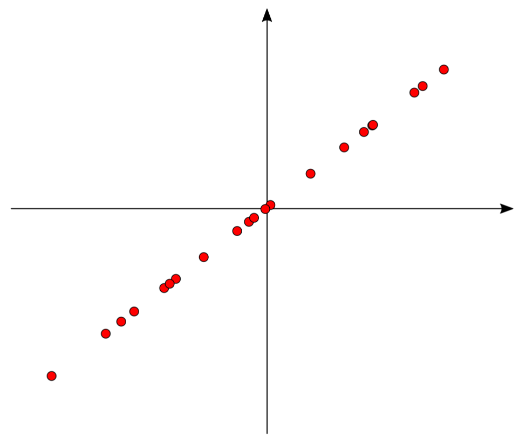
renvoie le vecteur $\mathbf{x}$ dans son espace d'origine en incluant la simplification.

Simplification des données



$$\mathbf{x}' = \mathrm{P}\mathrm{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

Simplification des données



$$\mathbf{x}' = \mathrm{P}\mathrm{P}'^{\top}\mathbf{x}$$

Exemple

Quel super héros êtes-vous?

Exemple

Quel super héros êtes-vous?

Les variables :

1. possède des super pouvoirs (0 ou 1)
2. porte des collants (appréciation entre 1 et 3)
3. travaille en équipe (appréciation entre 1 et 10)
4. possède un équipement particulier (appréciation entre 1 et 10)
5. homme / femme (1 ou 0)

Quel super héros êtes-vous?

Les individus :

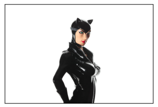

Superman


Batman


Spiderman


Hulk


Ironman


Catwoman


x-or


Daredevil


Wonderwoman


Bioman


x-men


Tortues ninjas

Les données

	1	**2**	**3**	**4**	**5**
Superman	1	3	2	2	1
Batman	0	3	7	10	1
Spiderman	1	3	2	2	1
Hulk	1	1	1	1	1
Ironman	0	1	3	10	1
Catwoman	0	3	2	3	0
x-or	0	1	2	10	1
Daredevil	0	3	2	3	1
Wonderwoman	1	2	3	9	0
Bioman	0	3	10	10	0.6
x-men	1	2	8	7	0.5
Tortues Ninja	0	1	10	7	0.8

Centrer les données

	1	2	3	4	5
Superman	1	3	2	2	1
Batman	0	3	7	10	1
Spiderman	1	3	2	2	1
Hulk	1	1	1	1	1
Ironman	0	1	3	10	1
Catwoman	0	3	2	3	0
x-or	0	1	2	10	1
Daredevil	0	3	2	3	1
Wonderwoman	1	2	3	9	0
Bioman	0	3	10	10	0.6
x-men	1	2	8	7	0.5
Tortues Ninja	0	1	10	7	0.8
moyenne	0.41	2.17	4.33	6.17	0.74

Centrer les données

	1	2	3	4	5
Superman	0.58	0.83	-2.33	-4.17	0.26
Batman	-0.42	0.83	2.67	3.83	0.26
Spiderman	0.58	0.83	-2.33	-4.17	0.26
Hulk	0.58	-1.17	-3.33	-5.17	0.26
Ironman	-0.42	-1.17	-1.33	3.83	0.26
Catwoman	-0.42	0.83	-2.33	-3.17	-0.74
x-or	-0.42	-1.17	-2.33	3.83	0.26
Daredevil	-0.42	0.83	-2.33	-3.17	0.26
Wonderwoman	0.58	-0.17	-1.33	2.83	-0.74
Bioman	-0.42	0.83	5.67	3.83	-0.14
x-men	0.58	-0.17	3.67	0.833	-0.24
Tortues Ninja	-0.42	-1.17	5.67	0.833	0.058
moyenne	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Normer les données

	1	2	3	4	5
Superman	0.58	0.83	-2.33	-4.17	0.26
Batman	-0.42	0.83	2.67	3.83	0.26
Spiderman	0.58	0.83	-2.33	-4.17	0.26
Hulk	0.58	-1.17	-3.33	-5.17	0.26
Ironman	-0.42	-1.17	-1.33	3.83	0.26
Catwoman	-0.42	0.83	-2.33	-3.17	-0.74
x-or	-0.42	-1.17	-2.33	3.83	0.26
Daredevil	-0.42	0.83	-2.33	-3.17	0.26
Wonderwoman	0.58	-0.17	-1.33	2.83	-0.74
Bioman	-0.42	0.83	5.67	3.83	-0.14
x-men	0.58	-0.17	3.67	0.833	-0.24
Tortues Ninja	-0.42	-1.17	5.67	0.833	0.058
variance	0.49	0.83	2.9	3.3	0.31

Normer les données

	1	2	3	4	5
Superman	1.2	1	-0.79	-1.3	0.83
Batman	-0.86	1	0.91	1.2	0.83
Spiderman	1.2	1	-0.79	-1.3	0.83
Hulk	1.2	-1.4	-1.1	-1.6	0.83
Ironman	-0.86	-1.4	-0.45	1.2	0.83
Catwoman	-0.86	1	-0.79	-0.96	-2.4
x-or	-0.86	-1.4	-0.79	1.2	0.83
Daredevil	-0.86	1	-0.79	-0.96	0.83
Wonderwoman	1.2	-0.2	-0.45	0.86	-2.4
Bioman	-0.86	1	1.9	1.2	-0.46
x-men	1.2	-0.2	1.2	0.25	-0.78
Tortues Ninja	-0.86	-1.4	1.9	0.25	0.19
variance	1	1	1	1	1

Matrice de covariance

$$\mathtt{C} = \begin{bmatrix} 1.1 & 0.04 & -0.36 & -0.56 & -0.13 \\ 0.04 & 1.3 & 0.01 & -0.34 & -0.24 \\ -0.36 & 0.01 & 1.3 & 0.68 & -0.16 \\ -0.56 & -0.34 & 0.68 & 1.2 & -0.16 \\ -0.13 & -0.24 & -0.16 & -0.16 & 1.5 \end{bmatrix}$$

Remarque :
Évidement, les meilleures corrélations sont sur la diagonale.

Méthode :
Quels sont les "axes forts" de cette matrice?
$\rightarrow$ vecteurs propres et valeurs propres.

Vecteurs propres et valeurs propres

$$\mathtt{C} = \begin{bmatrix} 1.1 & 0.04 & -0.36 & -0.56 & -0.13 \\ 0.04 & 1.3 & 0.012 & -0.34 & -0.24 \\ -0.36 & 0.012 & 1.3 & 0.68 & -0.16 \\ -0.56 & -0.34 & 0.68 & 1.2 & -0.16 \\ -0.13 & -0.24 & -0.16 & -0.16 & 1.5 \end{bmatrix}$$

Vecteurs propres et valeurs propres :

$$\begin{array}{ll} \lambda_1 = 2.4 & \mathbf{v}_1 = (0.45, 0.18, -0.59, -0.64, 0.11)^\top \\ \lambda_2 = 1.7 & \mathbf{v}_2 = (0.15, 0.48, 0.14, -0.037, -0.85)^\top \\ \lambda_3 = 1.2 & \mathbf{v}_3 = (0.35, -0.79, -0.22, 0.15, -0.43)^\top \\ \lambda_4 = 0.8 & \mathbf{v}_4 = (0.7, -0.02, 0.67 - 0.089, 0.23)^\top \\ \lambda_5 = 0.4 & \mathbf{v}_5 = (0.41, 0.33, -0.37, 0.75, 0.17)^\top \end{array}$$

vecteurs normés et orthogonaux entre eux.

Vecteurs propres et valeurs propres

Matrice des vecteurs propres :

$$\mathtt{P}^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^\top \end{bmatrix}$$

les vecteurs sont triés par valeur propres décroissante.

Vecteurs propres et valeurs propres

Un nouvel espace : $\mathtt{C} = \mathtt{PDP}^{-1} = \mathtt{PDP}^\top$

Pour aller dans cet espace : $\mathtt{A}'^\top = \mathtt{P}^\top \mathtt{A}^\top$

Plus généralement pour un individu $\mathbf{x}$: $\mathbf{x}' = \mathtt{P}^\top \mathbf{x}$

où $\mathbf{x}'$ est la représentation de $\mathbf{x}$ dans un espace plus pertinent.

Simplification des données

Réduction de $\mathtt{P}^\top$ **:**

$$\mathtt{P}^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \\ \mathbf{v}_{i+1} \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^\top \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \mathtt{P}'^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Simplification des données

Réduction de $\mathtt{P}^\top$ **:**

$$\mathtt{P}'^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \mathtt{P}'^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^\top \\ \mathbf{v}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{v}_i^\top \end{bmatrix}$$

Simplification des données

Réduction de $\mathtt{P}^\top$ **:**

$$\mathtt{P}^\top = \begin{bmatrix} 0.45 & 0.18 & -0.59 & -0.64 & 0.11 \\ 0.15 & 0.48 & 0.14 & -0.037 & -0.85 \\ 0.35 & -0.79 & -0.22 & 0.15 & -0.43 \\ 0.7 & -0.02 & 0.67 & -0.089 & 0.23 \\ 0.41 & 0.33 & -0.37 & 0.75 & 0.17 \end{bmatrix}$$

$$\mathtt{P}'^\top = \begin{bmatrix} 0.45 & 0.18 & -0.59 & -0.64 & 0.11 \\ 0.15 & 0.48 & 0.14 & -0.037 & -0.85 \\ 0.35 & -0.79 & -0.22 & 0.15 & -0.43 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Simplification des données

Projection :

$$\mathbf{x}' = \mathtt{P}'^\top \mathbf{x}$$

où $\mathbf{x}'$ a une dimension inférieure à celle de $\mathbf{x}$.

- $\rightarrow$ on ne garde dans $\mathbf{x}'$ que les k premières composantes, celles qui ont vraiment une signification.
- $\rightarrow$ chacune de ces composantes regroupe un ensemble de variables corrélées.

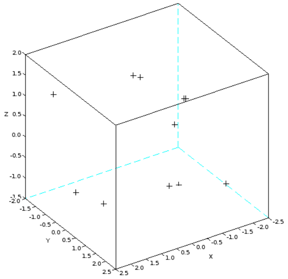
Lecture de l'acp

Quel super héros êtes-vous?

- on a gardé 3 dimensions
- pour un nouvel individu :

$$\mathbf{x}' = \mathtt{P}'^{\top} \frac{\mathbf{x} - \langle \mathtt{A}_{i,\bullet} \rangle}{\sigma(\mathtt{A}_{i,\bullet})}$$

- on regarde dans ce sous espace quel est le super héros le plus proche.



Super résumé

Résumé :

- centrer les données avec un vecteur $\langle \mathtt{A}_{i,\bullet} \rangle$
- normer les données avec un vecteur $\dfrac{1}{\sigma(\mathtt{A}_{i,\bullet})}$
- matrice de covariance $\mathtt{C}$
- vecteurs propres / valeurs propres de $\mathtt{C} \rightarrow \mathtt{P}^{\top}$
- choisir la dimension du sous espace : $\mathtt{P}'^{\top}$
- projeter des données : $\mathbf{x}' = \mathtt{P}'^{\top} \frac{\mathbf{x} - \langle \mathtt{A}_{i,\bullet} \rangle}{\sigma(\mathtt{A}_{i,\bullet})}$
- (optionnel) reprojection : $\mathbf{x}'' = \mathtt{P}\mathtt{P}'^{\top}\mathbf{x}$

Applications

Applications :

- détection de visages
- statistiques
- iArtist
- ...

iArtist

+

"Picasso"

→