

# Analyse en Composantes Principales

Benoit Gaüzère, Stéphane Canu  
benoit.gauzere@insa-rouen.fr

INSA Rouen Normandie - ITI

March 6, 2025

# Résumer l'information ?

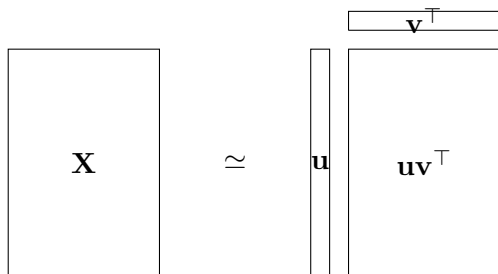
- ▶ Calculer une représentation avec moins de données mais un maximum d'informations
- ▶ Compression
- ▶ Suppression du bruit
- ▶ Visualisation en 2D ou 3D

# Résumer un tableau de données

Comment résumer l'information ?

- ▶ Résumer un tableau de données par deux vecteurs  $u$  et  $v$
- ▶  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$

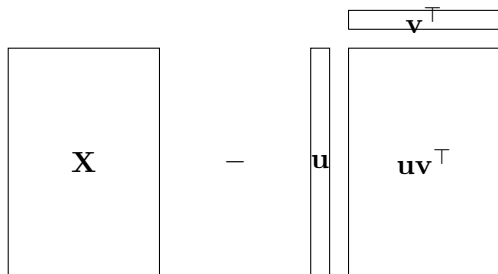
La meilleure représentation linéaire des observations est donnée par le couple de vecteurs  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$  et  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^p$  permettant au mieux de reconstruire la matrice  $\mathbf{X}$ .



## Reconstruction de $\mathbf{X}$

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad \text{avec} \quad J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_i^n \sum_j^p (x_{ij} - u_i v_j)^2$$

Aussi noté :  $J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2$



## Fonction de coût

La fonction coût  $\sum_i^n \sum_j^p (x_{ij} - u_i v_j)^2$  peut se réécrire :

$$\begin{aligned} J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \sum_i^n \sum_j^p x_{ij}^2 - 2 \sum_i^n \sum_j^p x_{ij} u_i v_j + \sum_i^n \sum_j^p (u_i v_j)^2 \\ &= \sum_i^n \sum_j^p x_{ij}^2 - 2 \sum_i^n \left( \sum_j^p x_{ij} v_j \right) u_i + \sum_i^n u_i^2 \sum_j^p v_j^2 \\ &= \sum_i^n \sum_j^p x_{ij}^2 - 2(\mathbf{X}\mathbf{v})^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 \end{aligned}$$

et donc

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} \underbrace{\|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2}_{J(\mathbf{u}, \mathbf{v})} \Leftrightarrow \min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} \underbrace{-2(\mathbf{X}\mathbf{v})^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2}_{\mathcal{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v})}$$

Comment résoudre

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} J(\mathbf{u}, \mathbf{v})?$$

# Comment résoudre

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} J(\mathbf{u}, \mathbf{v})?$$

⇒ La méthode du gradient

# Méthode du gradient



# Minimisation d'une fonction de plusieurs variables

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2$$

## Définition : Gradient

soit  $F$  une fonction de plusieurs ( $d$ ) variables :

$$\begin{aligned} F : \mathbb{R}^d &\longmapsto \mathbb{R} \\ \mathbf{x} &\longrightarrow F(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

On appelle gradient de  $F$  au point  $\mathbf{x}$  la fonction des dérivées partielles

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} F : \mathbb{R}^d &\longmapsto \mathbb{R}^d \\ \mathbf{x} &\longrightarrow \nabla_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x}) = \left( \frac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_i}, \dots, \frac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_d} \right)^\top \end{aligned}$$

# Minimisation d'une fonction de plusieurs variables

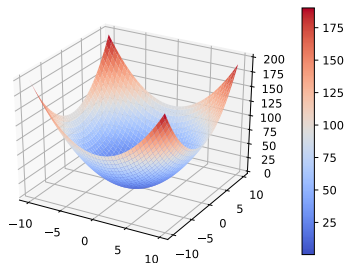
## Condition d'optimalité

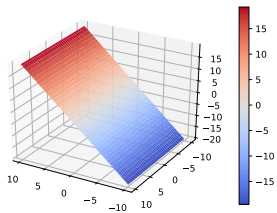
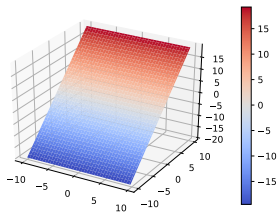
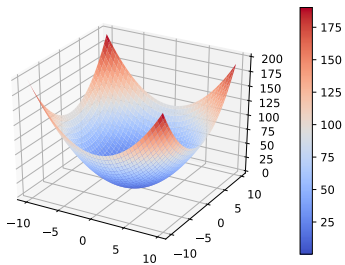
- ▶  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  est solution du problème de minimisation ssi le gradient de la fonction  $J$  s'annule en ce point



$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{u}} J(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) = 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} J(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) = 0 \end{cases}$$

- ▶  $F$  doit être convexe et différentiable
- ▶ Si  $F$  est strictement convexe : solution unique





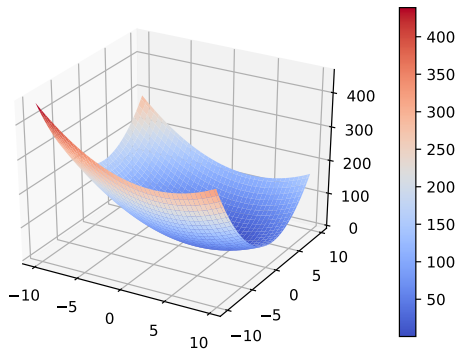
# Minimisation d'une fonction de plusieurs variables

## Exemple

$$\min_{x,y} J(x,y) = 2(x-a)^2 + (y-b)^2$$

## Méthode de résolution du problème

1. Calcul du gradient  $\nabla_{\mathbf{x}}F(x,y)$  et  $\nabla_{\mathbf{y}}F(x,y)$ 
  - ▶  $\nabla_x = 4(x-a)$
  - ▶  $\nabla_y = 2(y-b)$
2. Résolution des équations  $\nabla_{\mathbf{x}}F(x^*,y^*) = 0$  (2 équations à 2 inconnues)
  - ▶  $\nabla_x = 0 \Leftrightarrow x^* = a$
  - ▶  $\nabla_y = 0 \Leftrightarrow y^* = b$



# Introduction à l'ACP

# Reconstruction de $\mathbf{X}$

## Rappel du problème

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} \underbrace{\|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2}_{J(\mathbf{u}, \mathbf{v})} \Leftrightarrow \min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} \underbrace{-2(\mathbf{X}\mathbf{v})^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2}_{\mathcal{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v})}$$

## Résolution

Minimiser le coût c'est trouver  $\mathbf{u}$  et  $\mathbf{v}$  qui annulent le gradient :

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2 \Leftrightarrow \begin{cases} \nabla_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}) = 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}) = 0 \end{cases}$$

## Calcul du gradient

$$J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_i^n \sum_j^p x_{ij}^2 - 2 \sum_i^n \left( \sum_j^p x_{ij} v_j \right) u_i + \sum_i^n u_i^2 \sum_j^p v_j^2$$

### Gradient

$$\begin{cases} \frac{\partial J(\mathbf{u}, \mathbf{v})}{\partial u_i} = -2 \sum_j^p x_{ij} v_j + 2u_i \sum_j^p v_j^2 \\ \frac{\partial J(\mathbf{u}, \mathbf{v})}{\partial v_j} = -2 \sum_i^n x_{ij} u_i + 2v_j \sum_i^n u_i^2 \end{cases}$$

### Écriture matricielle du gradient<sup>1</sup>

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{u}} J(\mathbf{u}) = -2\mathbf{X}\mathbf{v} + 2\|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{u} \\ \nabla_{\mathbf{v}} J(\mathbf{v}) = -2\mathbf{X}^T \mathbf{u} + 2\|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v} \end{cases}$$

---

<sup>1</sup><https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf>



$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} \|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2$$

Conditions d'optimalité

$$\begin{cases} \nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{J}(\mathbf{u}) = 0 & \Leftrightarrow & -\mathbf{X}\mathbf{v} + \|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{u} = 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} \mathcal{J}(\mathbf{v}) = 0 & \Leftrightarrow & -\mathbf{X}^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v} = 0 \end{cases}$$

Solutions

$$\begin{cases} \mathbf{X}\mathbf{v} = \|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{u} \\ \mathbf{X}^\top \mathbf{u} = \|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v} \end{cases} \Rightarrow \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{v} = \|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{X}^\top \mathbf{u} = \underbrace{\|\mathbf{v}\|^2 \|\mathbf{u}\|^2}_{\lambda} \mathbf{v}$$

- ▶ Solution  $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$
- ▶  $p$  solutions  $(\mathbf{v}_i, \lambda_i)$ .

## Quel vecteur propre choisir ?

À l'optimum

$$\mathcal{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = -2(\mathbf{X}\mathbf{v})^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 \quad \text{et} \quad \mathbf{X}\mathbf{v} = \|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{u}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \mathcal{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= -2\|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{u}^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 \\ &= -2\|\mathbf{v}\|^2 \|\mathbf{u}\|^2 + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 \\ &= -\|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 = -\lambda \end{aligned}$$

$$\Rightarrow J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{X}\|_F^2 - \lambda$$

### Solution

La solution du problème est donc donnée par le vecteur propre associé à **la plus grande valeur propre** de la matrice  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  car :

$$\nabla_{\mathbf{v}} J(\mathbf{v}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{v} - \lambda \mathbf{v} = 0 \quad \text{avec} \quad J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{X}\|^2 - \lambda$$

Toutes les v.p. de  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$  (sdp.) sont positives.

## Résumé d'un tableau de données : résultat principal

### Théorème : (Eckart & Young, 1936)

La solution unique du problème d'optimisation

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad \text{avec} \quad J(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2$$

avec  $\|\mathbf{v}^*\| = 1$ , est donnée par

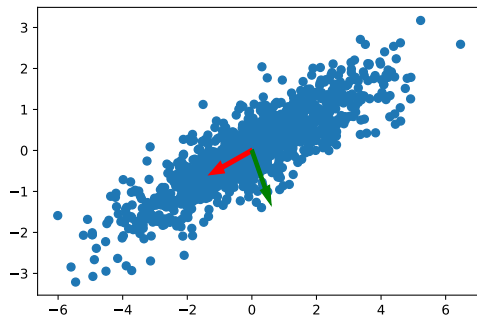
$$\mathbf{v}^* \quad \text{et} \quad \mathbf{u}^* = \mathbf{X} \mathbf{v}^*,$$

où  $\mathbf{v}^*$  est le vecteur propre normé associé à  $\lambda$  la plus grande valeur propre de la matrice  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ . De plus on a  $\|\mathbf{u}^*\| = \sqrt{\lambda}$ .

## En résumé

$$\min_{\mathbf{u}, \mathbf{v}} \|\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top\|_F^2$$

- ▶  $\mathbf{u} = \mathbf{X}\mathbf{v}$  : résumé de  $\mathbf{X}$  en 1D
- ▶  $\mathbf{v}$  : vecteur propre de  $\lambda_1$  de  $\Sigma$
- ▶  $\mathbf{v}$  : projection de  $\mathbb{R}^{n \times p} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times 1}$
- ▶  $\mathbf{v}^\top$  : projection de  $\mathbb{R}^{n \times 1} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times p}$



# Analyse de la signification de $\lambda$

Quelle est la variance de la projection  $\mathbf{u}$  ?

- ▶ Considérons  $\mathbf{X}$  centrée
- ▶  $\mathbf{u} = \mathbf{X}\mathbf{v}$ ,  $\bar{\mathbf{u}} = 0$
- ▶ Variance de  $\mathbf{u}$  :  $s_{\mathbf{u}}^2 = \frac{1}{n} \|\mathbf{u}\|^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i^2$
- ▶  $s_{\mathbf{u}}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{X}\mathbf{v})^\top \mathbf{X}\mathbf{v} = \frac{1}{n} \mathbf{v}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{v}$   
 $\Rightarrow s_{\mathbf{u}}^2 = \frac{1}{n} \lambda$ , avec  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$

Meilleure projection ?

- ▶  $\mathbf{v}$  est le premier axe factoriel de  $\mathbf{X}$
- ▶  $\mathbf{X}\mathbf{v}$  est la projection linéaire dont la variance est maximale
- ▶ Variance  $\Leftrightarrow$  Information

# Et ensuite ?

## Augmenter la quantité d'infos

- ▶ La matrice de projection peut être étendue à plusieurs dimensions
- ▶ Reconstructions de plus en plus précises



Comment faire ?

# Les Résidus I

## Matrice des résidus

Construisons la matrice des résidus  $\mathbf{R} = \mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top$

- ▶ Contient toute l'info "inexpliquée" par  $\mathbf{u}$

## Spectre de $\mathbf{R}$

- ▶  $\mathbf{R}^\top \mathbf{R}$  admet les mêmes valeurs/vecteurs propres que  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$

$$\begin{aligned} R^\top R \mathbf{v}_i &= (\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top)^\top (\mathbf{X} - \mathbf{u}\mathbf{v}^\top) \mathbf{v}_i \\ &= \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v}_i - 2\mathbf{X}^\top \mathbf{u}\mathbf{v}^\top \mathbf{v}_i + \mathbf{v}\mathbf{u}^\top \mathbf{u}\mathbf{v}^\top \mathbf{v}_i \\ &= \lambda_i \mathbf{v}_i \end{aligned}$$

NB:  $\mathbf{v}^\top \mathbf{v}_i = 0$  puisque les vecteurs propres sont orthogonaux entre eux.

## Spectre de $\mathbf{R}$

- ▶  $\mathbf{R}^\top \mathbf{R}$  admet les mêmes valeurs/vecteurs propres que  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$
- ▶ ... Sauf la plus grande  $\lambda$ :
  - ▶  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}$ ,  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_2$  et  $\lambda_2 < \lambda$
  - ▶ On a :

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^\top \mathbf{R} \mathbf{v} &= (\mathbf{X} - \mathbf{u} \mathbf{v}^\top)^\top (\mathbf{X} - \mathbf{u} \mathbf{v}^\top) \mathbf{v} \\ &= \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v} - 2 \mathbf{v} \mathbf{u}^\top \mathbf{X} \mathbf{v} + \mathbf{v} \mathbf{u}^\top \mathbf{u} \mathbf{v}^\top \mathbf{v} \\ &= \lambda \mathbf{v} - 2 \|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{v} \\ &= \lambda \mathbf{v} - \|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v} \qquad \qquad \qquad = 0 \end{aligned}$$

- ▶ NB:  $\mathbf{u} = \mathbf{X} \mathbf{v}$ ,  $\|\mathbf{v}\|^2 = 1$  et  $\|\mathbf{u}\|^2 = \|\mathbf{X} \mathbf{v}\|^2 = \mathbf{v}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v} = \lambda$





## $k$ premiers axes factoriels

### Lemme

Le sous-espace de dimension  $k$  maximisant la variance des projections contient nécessairement le sous-espace de dimension  $k - 1$ .

### $k$ -ième axe factoriel

- ▶  $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{v}_k = \lambda_k \mathbf{v}_k$ ,  $\lambda_k$  :  $k$ -ième valeur propre.
- ▶ Matrice de projection  $\mathbf{P}_k : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^k$ :

$$\mathbf{P}_k = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \dots \quad \mathbf{v}_k]$$

- ▶ Les  $k$  vecteurs propres liées aux  $k$  plus grandes valeurs

# Algorithmme

1. Centrer les données :  $\{\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^p\}_{i=1}^N \longrightarrow \{\tilde{\mathbf{x}}_i = \mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^p\}_{i=1}^N$
2. Calculer la matrice de covariance  $\Sigma = \frac{1}{N} \tilde{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{X}}$  avec  
 $\tilde{\mathbf{X}}^\top = (\tilde{\mathbf{x}}_1 \quad \cdots \quad \tilde{\mathbf{x}}_N)$
3. Calculer la décomposition en valeurs propres  $\{\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^p, \lambda_j \in \mathbb{R}\}_{j=1}^p$  de  $\Sigma$
4. Ordonner les valeurs propres  $\lambda_j$  par ordre décroissant
5. Nouvelle base de représentation des données :

$$\mathbf{P} = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k) \in \mathbb{R}^{p \times k}$$

$\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$  sont les  $k$  vecteurs propres associés aux  $k$  plus grandes valeurs propres  $\lambda_j$ .

6. Projection de tous les points sur  $\mathbf{P}$  :

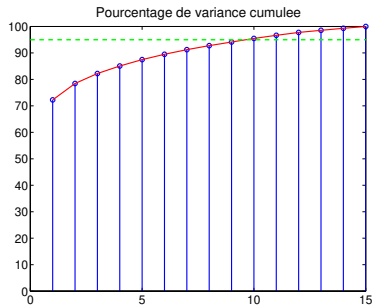
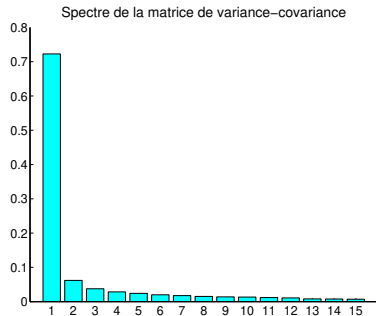
$$\mathbf{C} = \mathbf{X}\mathbf{P} \text{ avec } \mathbf{C} = \begin{pmatrix} t_1^\top \\ \vdots \\ t_N^\top \end{pmatrix}, \quad t_i^\top = \tilde{\mathbf{X}}(i, :)\mathbf{P}$$

## Propriétés des axes factoriels

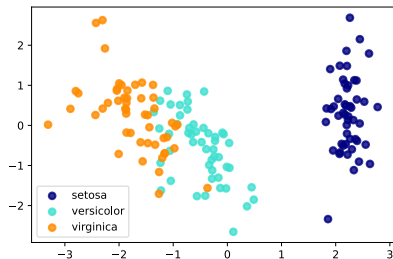
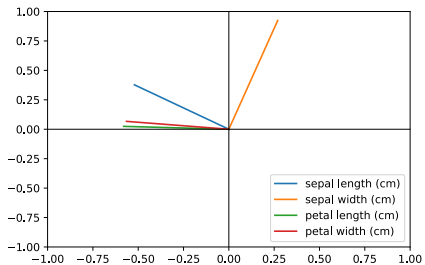
- ▶ Les valeurs propres de  $\Sigma$  sont positives car  $\Sigma$  est une matrice semi-définie positive
- ▶ Le nombre d'axes factoriels est égal au nombre de valeurs propres non-nulles de  $\Sigma$ .
- ▶ Variance expliquée par l'axe factoriel  $\mathbf{v}_k$  :  $I_k = \mathbf{v}_k^\top \Sigma \mathbf{v}_k = \lambda_k$ .
- ▶ Variance totale des axes factoriels :  $I = \sum_{k=1}^p \lambda_k$
- ▶ Pourcentage de variance expliquée par les  $d$  premiers axes

$$\frac{\sum_{k=1}^d \lambda_k}{\sum_{k=1}^D \lambda_k} \cdot 100$$

# Propriétés des axes factoriels



# Exemple sur Iris









# ACP : Conclusion

## Méthode de réduction de dimension

- ▶ Matrice de projection  $\mathbf{P}$  :  $d$  premiers vecteurs propres de  $\Sigma$
- ▶ Centrer/réduire les données
- ▶ Projection :  $\mathbf{X}_d = \mathbf{XP}$
- ▶ Information de l'axe  $\mathbf{v}_k$  :  $\lambda_k$
- ▶ Reconstruction :  $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}_d\mathbf{P}^\top$
- ▶ Les derniers vecteurs propres contiennent le “bruit”

## Limites

- ▶ Méthode de projection linéaire
- ▶ Hypothèse de distribution gaussienne

Bonus

## Un autre mode de calcul du gradient

$\mathcal{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = -2(\mathbf{X}\mathbf{v})^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v}\|^2$ , le minimum est atteint lorsque le gradient s'annule.

gradient d'une fonction :  $J : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$

par définition le gradient  $\nabla_J(\mathbf{v})$  s'obtient en posant  $\phi(t) = J(\mathbf{v} + t\mathbf{d})$  où  $\mathbf{d}$  est un vecteur de  $\mathbb{R}^p$  et en calculant la valeur de la dérivée de  $\phi$  au point zéro qui vérifie  $\phi'(0) = \mathbf{d}^\top \nabla_J(\mathbf{v})$ .

Faisons le calcul

$$\begin{aligned}\phi(t) &= \mathcal{J}(\mathbf{u}, \mathbf{v} + t\mathbf{d}) \\ &= -2(\mathbf{X}(\mathbf{v} + t\mathbf{d}))^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 \|\mathbf{v} + t\mathbf{d}\|^2 \\ &= -2(\mathbf{v}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{u} + t\mathbf{d}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{u}) + \|\mathbf{u}\|^2 (\|\mathbf{v}\|^2 + t^2 \|\mathbf{d}\|^2 + 2t \mathbf{v}^\top \mathbf{d})\end{aligned}$$

$$\phi'(t) = -2\mathbf{d}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{u} + \|\mathbf{u}\|^2 (2t\|\mathbf{d}\|^2 + 2\mathbf{v}^\top \mathbf{d})$$

$$\phi'(0) = -2\mathbf{d}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{u} + 2\|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v}^\top \mathbf{d}$$

$$= \mathbf{d}^\top (-2\mathbf{X}^\top \mathbf{u} + 2\|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v}) \Rightarrow \nabla_{\mathbf{v}} \mathcal{J}(\mathbf{v}) = -2\mathbf{X}^\top \mathbf{u} + 2\|\mathbf{u}\|^2 \mathbf{v}$$