

Analyse, Classification et Indexation des données (ACID)

Réduction de dimension, Partie 1 : ACP

Akka Zemmari

LaBRI, Université de Bordeaux

2023 - 2024

Malédiction de la dimensionnalité

Malédiction de la dimensionnalité = "Curse of Dimensionality" =
CD

¹[https://medium.com/@paritosh_30025/
curse-of-dimensionality-f4edb3efa6ec](https://medium.com/@paritosh_30025/curse-of-dimensionality-f4edb3efa6ec)

Malédiction de la dimensionnalité

Malédiction de la dimensionnalité = "Curse of Dimensionality" =
CD En gros¹ :



Figure 1 - One-dimension scenario

Malédiction de la dimensionnalité

Malédiction de la dimensionnalité = "Curse of Dimensionality" =
CD En gros¹ :



Figure 1 - One-dimension scenario

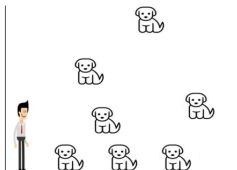


Figure 2 - Two-dimension Scenario

Malédiction de la dimensionnalité

Malédiction de la dimensionnalité = "Curse of Dimensionality" =
CD En gros¹ :



Figure 1 - One-dimension scenario

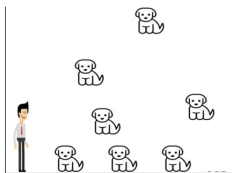


Figure 2 - Two-dimension Scenario

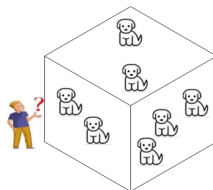


Figure 3 - Three-dimension scenario

¹https://medium.com/@paritosh_30025/curse-of-dimensionality-f4edb3efa6ec

Malédiction de la dimensionnalité

Malédiction de la dimensionnalité = "Curse of Dimensionality" = CD En gros¹ :



Figure 1 - One-dimension scenario

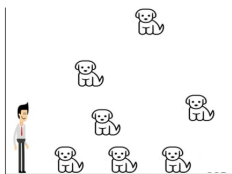


Figure 2 - Two-dimension Scenario

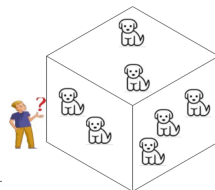


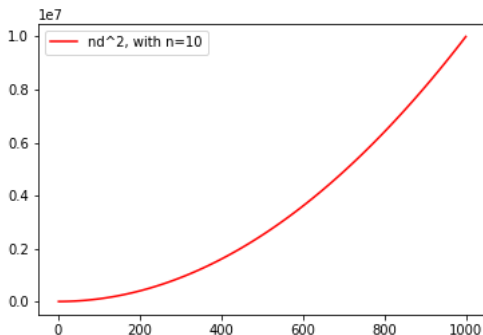
Figure 3 - Three-dimension scenario

Dans la suite : Soit \mathcal{S} un dataset avec d variables (dimension d) et n exemples

¹https://medium.com/@paritosh_30025/curse-of-dimensionality-f4edb3efa6ec

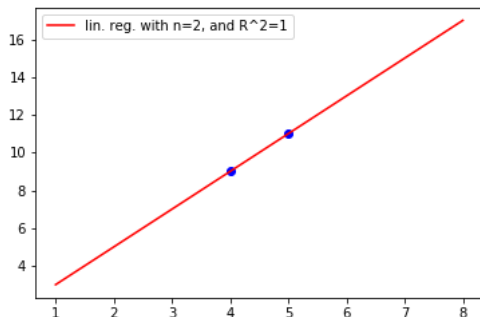
CD et complexité

- ▶ La complexité augmente en fonction de la dimension d
- ▶ Exemple : on veut estimer la matrice de covariance, la complexité en temps est alors de $O(nd^2)$



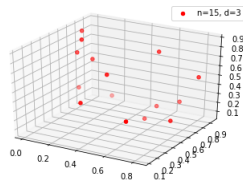
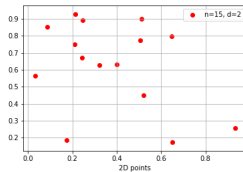
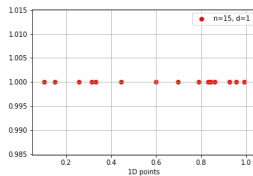
CD et sur-apprentissage (overfitting)

- ▶ Si d est grand, n peut être trop petit pour une bonne estimation des paramètres d'un modèle.
- ▶ Exemple : retour sur la régression linéaire avec un $R^2 = 1$ mais



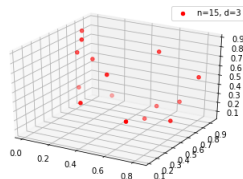
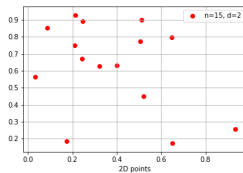
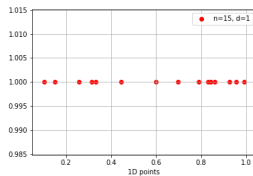
CD et nombre d'exemples

Soit les trois figures suivantes :



CD et nombre d'exemples

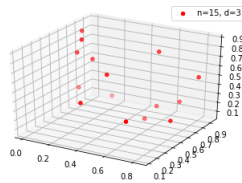
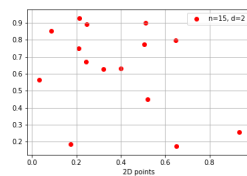
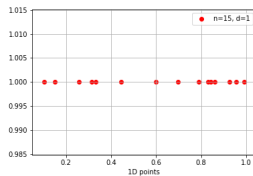
Soit les trois figures suivantes :



- ▶ Que pouvez-vous dire sur la densité des points dans chaque figure ?

CD et nombre d'exemples

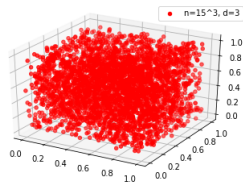
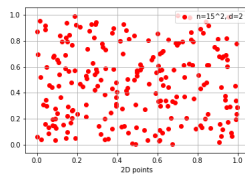
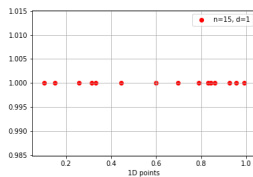
Soit les trois figures suivantes :



- ▶ Que pouvez-vous dire sur la densité des points dans chaque figure ?
- ▶ Si vous deviez utiliser un k -nn avec par exemple $k = 1$, quelle dimension auriez-vous choisi ? Pourquoi ?

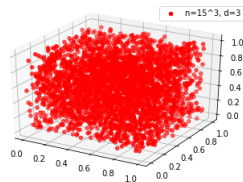
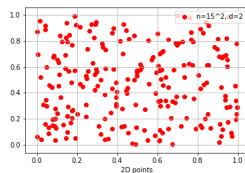
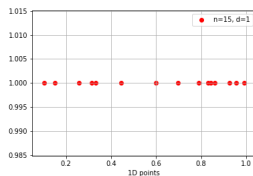
CD et nombre d'exemples

Si on veut retrouver la même densité que pour $d = 1$:



CD et nombre d'exemples

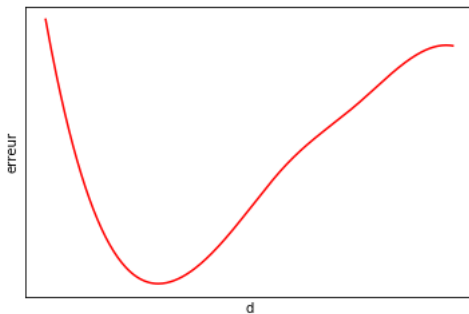
Si on veut retrouver la même densité que pour $d = 1$:



- Il faudrait donc disposer de $n' = n^d$ exemples pour garantir la même densité ...

CD et nombre d'exemples

En fait, si on fixe n (le nombre d'exemples) et qu'on augmente d , la courbe des erreurs (de classification) se comportera comme suit :



Malédiction de la dimensionnalité

Pour résumer ...

- ▶ Il faut éviter d'avoir beaucoup de descripteurs, ...
- ▶ Dans la pratique : on n'a pas vraiment le choix !

Malédiction de la dimensionnalité

Exemple :

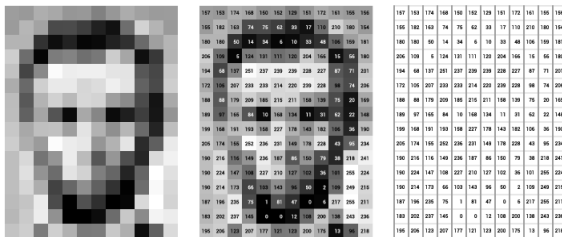


Figure: Une image = un tableau à $m \times n$ pixels

- ▶ Avec un pixel = un descripteur, l'image est de dimension $m \times n$. \Rightarrow Dans le cas de la figure : on a $d = 16 \times 12 = 192$
- ▶ Ainsi, si un échantillon de taille 10 est suffisant pour $d = 1$, il nous faudrait (juste !!) 10^{192} images.

Malédiction de la dimensionnalité

Remarques :

- ▶ Tous les pixels ne sont pas significatifs
- ▶ → on n'a pas vraiment $m \times n$ descripteurs
- ▶ Avec du "feature engineering", on peut réduire la dimension

Réduction de dimension

Pas de "Feature engineering" ici mais plutôt de la combinaison de descripteurs (Feature Combination) :

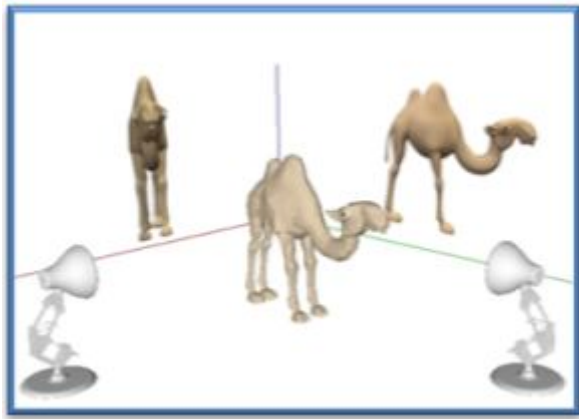
- ▶ Analyse en Composantes Principale (ACP)
- ▶ Analyse Linéaire Discriminante (LDA).

ACP : idées de base

- ▶ Transformer des variables très corrélées en nouvelles variables décorrélées les unes des autres.
- ▶ Il s'agit en fait de résumer l'information qui est contenue dans un dataset en un certain nombre de variables synthétiques : les **Composantes principales**.

ACP : idées de base

Exemple 1.

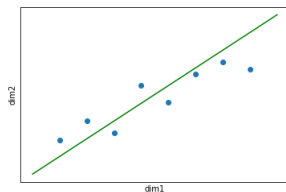
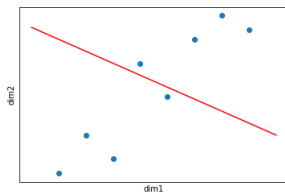


ACP : idées de base

Exemple 2.

Projeter des données 2-D sur une ligne tout en minimisant l'erreur de projection.

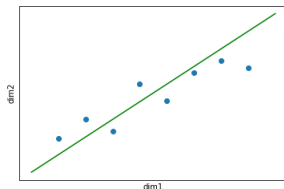
Faites votre choix :



Quelle est la meilleure droite (1-D) ? Expliquer.

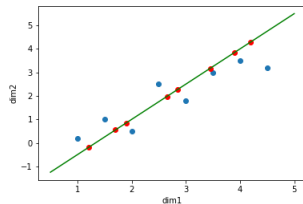
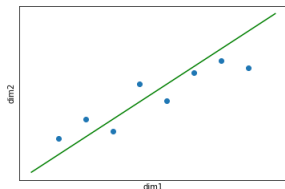
ACP : idées de base

On voit clairement que la meilleure droite est la droite verte. La projection des points sur cette droite conserve plus l'information contenue dans le nuage.



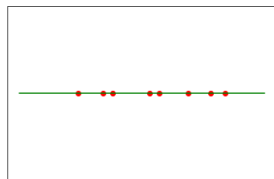
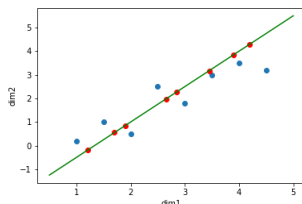
ACP : idées de base

On voit clairement que la meilleure droite est la droite verte. La projection des points sur cette droite conserve plus l'information contenue dans le nuage.



ACP : idées de base

- ▶ Une fois les points projetés, il faut transformer le système de coordonnées pour obtenir une représentation 1-D.



- ▶ les nouvelles données (1-D) ont la même variance que les données initiales dans la direction de la ligne verte.
- ▶ Justement, l'ACP préserve la plus grande variance des données. (On y reviendra).

ACP : utilisation

- ▶ Compression de données,
- ▶ Visualisation de données,
- ▶ Accélération de l'apprentissage,
- ▶ ...

ACP : Objectif

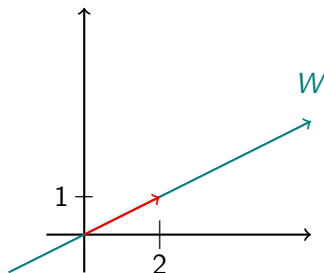
- ▶ Données d'origine : $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)$.
Les variables X_i sont fortement corrélées.
- ▶ Ce que l'on cherche : $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_q)$, tel que :
 - ▶ $Y_j = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_p X_p$,
 - ▶ les variables Y_j sont indépendantes,
 - ▶ avec une perte d'information la plus petite possible ...

ACP : Rappels

- ▶ V un espace de dimension d , W un sous espace de V de dimension k .
- ▶ On peut toujours trouver k vecteurs de dimension d , $\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ formant une base orthonormée de W , i.e., $\langle e_i, e_j \rangle = 0$ pour tout $i \neq j$ et $\langle e_i, e_i \rangle = 1$.
- ▶ \Rightarrow tout vecteur u de W peut s'écrire $u = \sum_{i=1}^k \alpha_i e_i$.

ACP : Rappels

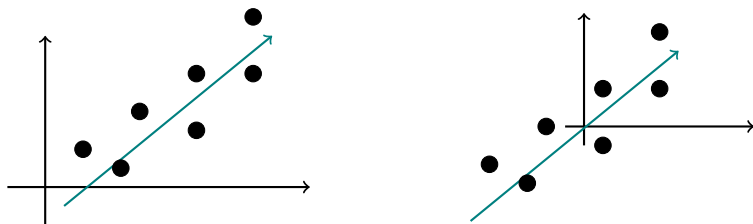
► Exemple.



- $V = \mathbb{R}^2$,
- W la droite d'équation $x - 2y = 0$,
- $e = \left(\frac{1}{\sqrt{5}}, \frac{-2}{\sqrt{5}}\right)^t$ est une base orthonormée de W

ACP

L'origine du (des) nouvel (nouveaux) axe(s) doit être au centre du nuage de points :



Ce qui revient à centrer les données :

$$z = x - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = x - \bar{x},$$

Attention : prenez le temps de comprendre ce que représentent les x , x_i , et z , des scalaires ? des vecteurs ? des matrices ?

ACP

Rappelons ce que l'on cherche à faire...

- ▶ On cherche à trouver une représentation assez fidèle d'un dataset $\mathcal{S} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ dans un sous espace W de dimension $k < d$
- ▶ On va plutôt travailler avec les données centrées, i.e., $\{z_1, z_2, \dots, z_n\}$.

ACP

- ▶ Soit $\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ la base orthonormée de W . Chaque vecteur u dans W peut être écrit en fonction de la base :

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i e_i$$

- ▶ z_j sera représenté par un vecteur dans W :

$$z_j = \sum_{i=1}^k \alpha_{ji} e_i$$

ACP

- ▶ l'erreur, pour z_j , peut alors être représentée par :

$$erreur_j = \left\| z_j - \sum_{i=1}^k \alpha_{ji} e_i \right\|^2$$

- ▶ L'erreur totale pour tout le dataset \mathcal{S} :

$$J(e_1, e_2, \dots, e_k, \alpha_{11}, \alpha_{12}, \dots, \alpha_{nk}) = \sum_{j=1}^n \left\| z_j - \sum_{i=1}^k \alpha_{ji} e_i \right\|^2$$

Objectif de l'ACP : trouver les bons paramètres e_1, e_2, \dots, e_k et $\alpha_{11}, \alpha_{12}, \dots, \alpha_{nk}$ tels que J soit minimale.

ACP

Théorème de l'ACP

J est minimale si on prend comme base, pour W , les k vecteurs propres associés aux k plus grandes valeurs propre de de la "scatter matrix" $S = (n - 1)\hat{\Sigma}$. $\hat{\Sigma}$ étant la matrice de covariance.

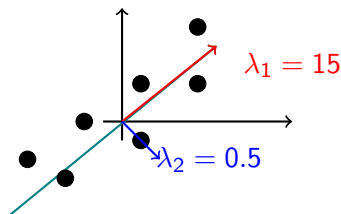
Preuve :

Voir le tableau.

ACP

Interprétation

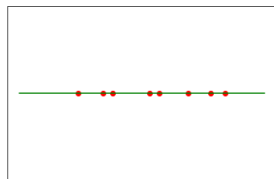
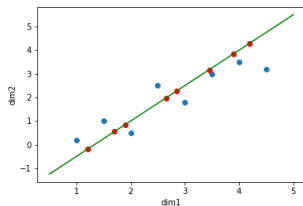
- ▶ Chaque valeur propre représente la variance dans la direction de son vecteur propre associé.



- ▶ En fait, l'ACP ne fait rien d'autre qu'une rotation jusqu'à ce que les directions conservant un maximum de variance soit trouvées ...

ACP : une dernière étape

- ▶ Comment changer les coordonnées pour obtenir le vecteur y de dimension k :



- ▶ Soit E la matrice $E = (e_1, e_2, \dots, e_k)$. Le nouveau vecteur s'obtient comme suit :

$$y = E^t x$$

- ▶ Exercice : les vecteurs propres forment la base standard sous E^t .

L'ACP en une page

Données : $\mathcal{S} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$.

Chaque x_i est un vecteur de dimension d ;

Objectif : réduire la dimension de d à k

1. Calculer la moyenne de l'échantillon $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$
2. Centrer les données : $z_j = x_j - \bar{x}$
3. Calculer la "scatter matrix" : $S = (n - 1) \sum_{j=1}^n z_j z_j^t$
4. Calculer les vecteurs propres e_1, e_2, \dots, e_k associés aux k plus grandes valeurs propres de S
5. Soit $E = (e_1, e_2, \dots, e_k)$
6. Le vecteur recherché est

$$y = E^t z$$

L'ACP en pratique

Voir le Jupyter notebook...

ACP : Nombre de facteurs

On récapitule :

- ▶ On cherche à projeter le nuage de points dans des espaces géométriques de dimension 1 (un axe), 2 (un plan), 3 (un espace "ordinaire"), ... de manière à déformer le moins possible les distances entre les individus, et donc la variabilité observée.
- ▶ Le meilleur axe est le premier axe factoriel ;
- ▶ Le meilleur plan est défini par l'axe factoriel précédent et un deuxième axe orthogonal au précédent. ...
- ▶ **La variance** de la composante principale Y_k est égale à la k -ième **valeur propre**.

ACP : Nombre de facteurs

Question :

Quel est le nombre d'axes à garder ? 1 ?, 2 ?, ...

Réponse : cela dépend ...

- ▶ On peut vouloir (absolument) garder une variabilité supérieure à un seuil → la somme des plus grande valeurs propres doit être supérieure à la variance souhaitée;
- ▶ On peut vouloir garder une certaine qualité des données (exemple : ACP pour la compression)
- ▶ de manière générale : utiliser un critère, par exemple le critère du "coude".

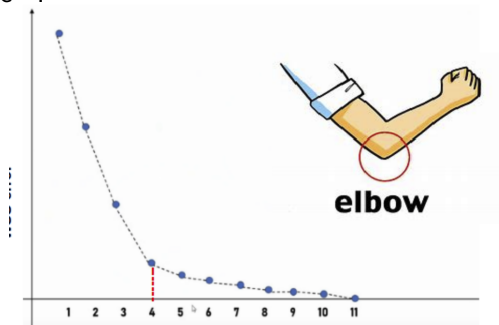
ACP : Nombre de facteurs

Question :

Quel est le nombre d'axes à garder ? 1 ?, 2 ?, ...

Réponse : cela dépend ...

- ▶ de manière générale : utiliser un critère, par exemple le critère du "coude" :



ACP : Nombre de facteurs

Question :

Quel est le nombre d'axes à garder ? 1 ?, 2 ?, ...

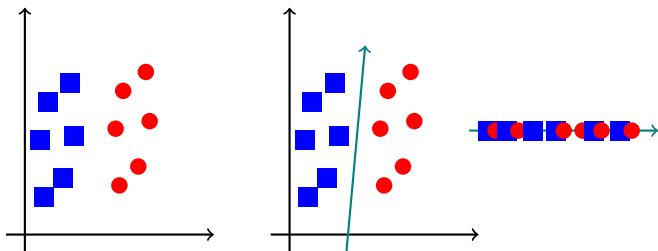
Réponse : cela dépend ...

- ▶ de manière générale : utiliser un critère, par exemple le critère du "coude" :

Voir le Jupyter notebook

ACP : limites

- ▶ L'ACP est conçue pour représenter des données, et non pour les classifier,
 - ▶ elle préserve la variance autant que possible,
 - ▶ si les directions à plus grandes variances coïncident avec les bons choix pour la classification alors elle peut servir
- ▶ En général, la direction conservant la plus grande variance peut ne pas être avantageuse pour la classification :



ACP : limites

Solution : Faire une LDA