STA 201 Statistique Multivariée Approfondie

- Inscriptions et agréments (master actuariat, MR085)
- Programme
- Modalités de contrôle
- SAS https://depotstat.cnam.fr/
- Informations http://cedric.cnam.fr/~saporta/Cours.html

Programme

3 octobre	Présentation du cours. Vecteurs gaussiens, domaines de confiance et de tolérance
10 octobre	Simulation, bootstrap
17 octobre	Exercices (E.Jakobowicz, Addinsoft)
24 octobre	Traitement de la multicolinéarité en régression (ridge, PLS, RCP) 1
31 octobre	Traitement de la multicolinéarité en régression (ridge, PLS, RCP) 2
7 novembre	Méthodes « sparse » en ACP et régression
14 novembre	Codages, recodages et régression monotone
21 novembre	Analyse conjointe 1
28 novembre	Analyse conjointe 2
5 décembre 12 décembre	Régression robuste et non-paramétrique Choix de modèles, meta-modèles
19 décembre	Introduction à la théorie de l'apprentissage
9 janvier	Modèles à variables latentes (analyse factorielle, classes latentes)
16 janvier	Equations structurelles 1 (E.Jakobowicz, Addinsoft)
23 janvier	Equations structurelles 2 (E.Jakobowicz, Addinsoft)

13 février	Analyse factorielle discriminante et fonction de Fisher
20 février 27 février	Discrimination et scoring sur variables qualitatives Discrimination probabiliste sous hypothèses de normalité
6 mars	Mesures de performance
20 mars	Régression logistique 1
27 mars	Régression logistique 2
3 avril	Séparateurs à vaste marge (SVM)
17 avril	Estimation de densité, discriminante non-parametrique
24 avril	Etudes de cas (N.Niang, CNAM)
15 mai	Multidimensional scaling
22 mai	Tableaux multiples et données évolutives (N.Niang, CNAM)
29 mai	Pas de cours
5 juin	Données fonctionnelles 1 (C.Preda, Polytech'Lille)
12 juin	Données fonctionnelles 2 (C.Preda, Polytech'Lille)

Bibliographie

- M.BARDOS : *Analyse discriminante* (Dunod, 2001)
- B.ESCOFIER, J.PAGES : *Analyses factorielles simples et multiples*, 4ème édition (Dunod, 2008)
- T.HASTIE, J.FRIEDMAN, R.TIBSHIRANI : *The Elements of Statistical Learning*, 2ème édition (Springer, 2009)

  http://www.stanford.edu/~hastie/local.ftp/Springer/ESLII_print5.pdf
- L.LEBART, M.PIRON, A.MORINEAU : *Statistique exploratoire multidimensionnelle*, 4ème édition (Dunod, 2006)
- J.P.NAKACHE, J.CONFAIS : *Statistique explicative appliquée* (Technip, 2003)
- G.SAPORTA : *Probabilités, analyse des données, statistique*, 3ème édition (Technip, 2011)
- S.TUFFERY : *Data mining et statistique décisionnelle*, 3ème édition (Technip, 2010)

Eléments d'analyse multivariée

Gilbert Saporta

Conservatoire National des Arts et Métiers, Paris

gilbert.saporta@cnam.fr

http://cedric.cnam.fr/~saporta

octobre 2012

I.Généralités sur les vecteurs aléatoires

- **I.1 Fonction de répartition et densité**

$x \in R^p$

$$F(x_1,...,x_p) = P(X_1 < x_1 \bigcap ... \bigcap X_p < x_p)$$

$$f(x_1,...,x_p) = \frac{\partial^p F(x_1,...,x_p)}{\partial x_1 ... \partial x_p}$$

- Changement de variable

$$\mathbf{Y} = \varphi(\mathbf{X})$$

$$Y_i = \varphi_i(X_1, .., X_p)$$

- Densité

$$g(\mathbf{y}) = \frac{f(\varphi^{-1}(\mathbf{y}))}{\left|\det \mathbf{J}\right|}$$

- J jacobien

$$\mathbf{J} = \begin{vmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_1}{\partial x_p} \\ \dots & & \\ \frac{\partial y_p}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_p}{\partial x_p} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial x_1}{\partial y_p} \\ \dots & & \\ \frac{\partial x_p}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial x_p}{\partial y_p} \end{vmatrix}^{-1}$$

- **I.2 Fonction caractéristique** (transformée de Fourier de la densité)

$$\varphi_{\mathbf{X}}(\mathbf{a}) = E(\exp i\mathbf{a}'\mathbf{x}) = E(\exp i(\sum_{j=1}^{p} a_j X_j))$$

- Condition nécessaire et suffisante d'indépendance

$$\varphi_{\mathbf{X}}(\mathbf{a}) = \prod_{j=1}^{p} E(\exp i a_j X_j) = \prod_{j=1}^{p} \varphi_j(a_j)$$

- **Théorème de Cramer-Wold** (1936):
  - La loi de X est déterminée de façon unique par celle des combinaisons linéaires des composantes

$$Y = \mathbf{a}'\mathbf{x} = \sum_{j=1}^{p} a_j X_j$$

$$\varphi_Y(t) = E(\exp(itY)) = E(\exp(it\mathbf{a}'\mathbf{x}))$$

$$\varphi_Y(1) = \varphi_{\mathbf{X}}(\mathbf{a})$$

Harald Cramer
1893-1985

Herman Wold
1908-1992

I.3 Espérance et matrice de variance

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} E(X_1) \\ . \\ . \\ E(X_p) \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \\ \dots & & \\ \dots & & \sigma_p^2 \end{pmatrix} = E(\mathbf{xx}') - \boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\mu}'$$

- Transformation linéaire **y=Ax**

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}} \qquad \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{x}}\mathbf{A}'$$

- Cas particulier y=a’x

$$V(y) = \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}$$

- CNS pour être une matrice de variance:
  - Σ symétrique positive

- Σ a une racine carrée: $\Sigma^{1/2}$

- **I.4 Transformation de Mahalanobis:**

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

  - Composantes de Y centrées, réduites, non-corrélées

- Distance de Mahalanobis au centre:

$$D^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{y}'\mathbf{y}$$

$$E(D^2) = p \quad \text{car } D^2 = \sum_{j=1}^{p} Y_j^2$$

- Pour toute matrice orthogonale P ($P' = P^{-1}$), P$\mathbf{y}$ a aussi ses composantes centrées, réduites et non-corrélées.

Prasanta Chandra Mahalanobis

-

1893-1972

- Fondateur de l'Indian Statistical Institute 1931
- *On the generalized distance in statistics*, 1936
- Mahalanobis International Award in Statistics depuis 2003

I.5 Composantes principales

- Combinaisons linéaires de variance maximale : $V(y) = \mathbf{a}'\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{a}$

- $\mathbf{a}$ vecteur propre de $\boldsymbol{\Sigma}$

II Loi normale à p dimensions

- **II.1 Définition**
  - X suit une N_p si et seulement si toute combinaison linéaire des composantes suit une loi normale
  - $N_p(\mu; \Sigma)$
  - Les composantes de X sont indépendantes si et seulement si Σ est diagonale

II.2 Densité

$$f(x_1,\ldots,x_p) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}\left|\boldsymbol{\Sigma}\right|^{1/2}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$$

- Démonstration: changement de variable: $\mathbf{y}$ est $N_p(0;I)$

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})$$

$$g(y) = \prod_{j=1}^{p}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}y_j^2\right) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}}\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{p}y_j^2\right)$$

puis jacobien et retour à **x**

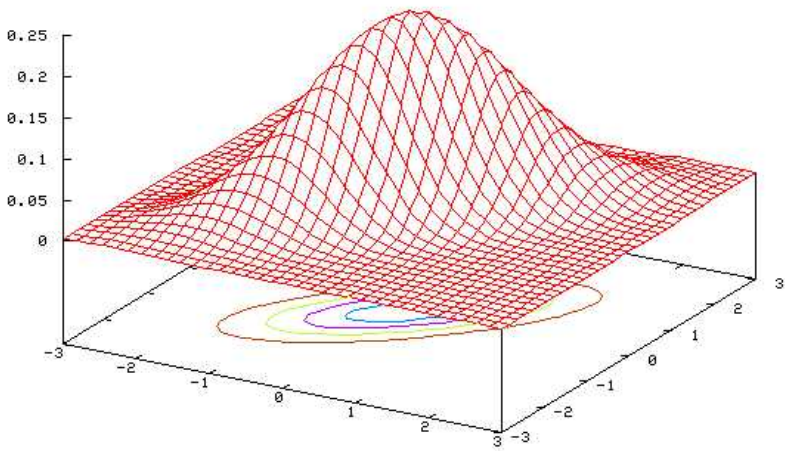
- II.3 loi de D^2 et surfaces d'isodensité

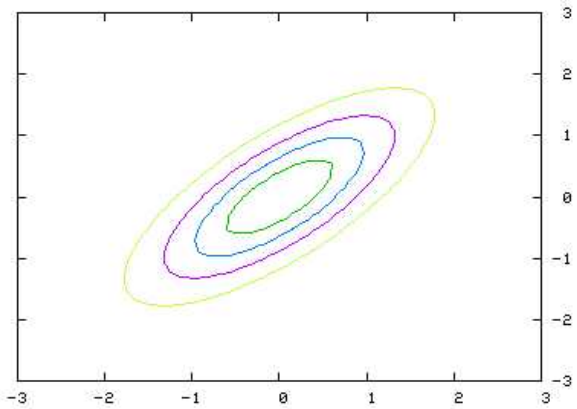
$$D^2 = (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{y}'\mathbf{y} = \sum_{j=1}^{p} Y_j^2$$

- D^2 suit une loi du khi-deux à p degrés de liberté

- $f(x)=c \Rightarrow D^2=k$: ellipsoïde

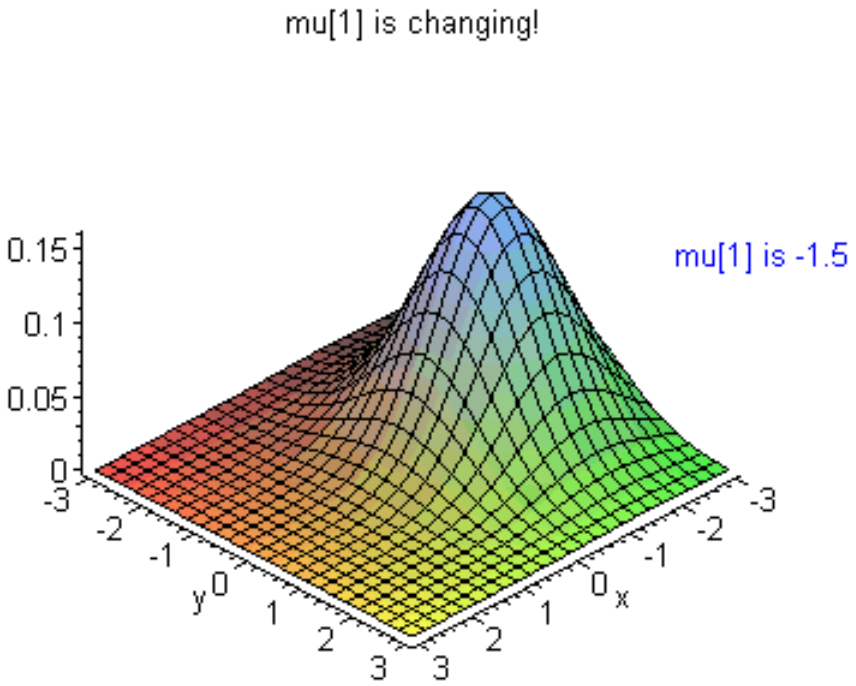
Loi normale à deux dimensions





Source: http://azzalini.stat.unipd.it/SN/plot-SN2.html

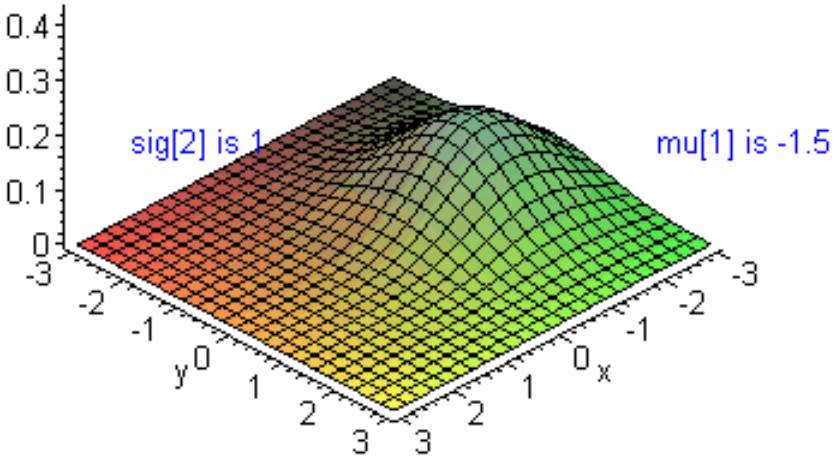
Loi normale à deux dimensions



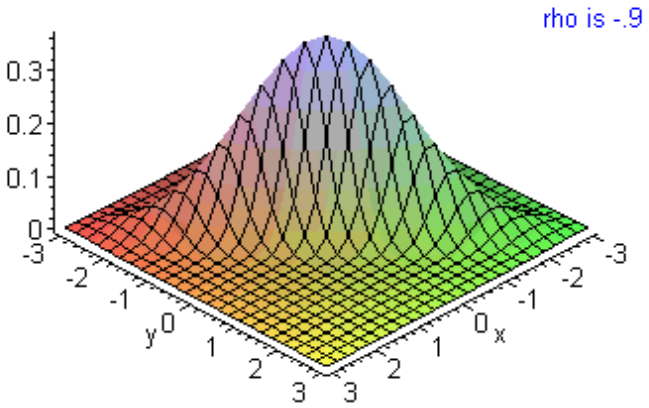
- Source : http://www2.kenyon.edu/people/hartlaub/MellonProject/Bivariate2.html

Loi normale à deux dimensions

sigma[2] is changing, too!



rho across (-1,1)



III Quelques problèmes d'inférence

- **III.1 Centre de gravité d'un nuage de points**
  - n observations iid

$$\begin{pmatrix} x_1^1 & \cdots & x_1^p \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n^1 & \cdots & x_n^p \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{g} = (\overline{x}^1; \overline{x}^2; \ldots.; \overline{x}^p)$$

$$E(\mathbf{g}) = \boldsymbol{\mu} \qquad \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g}} = \frac{\boldsymbol{\Sigma}}{n}$$

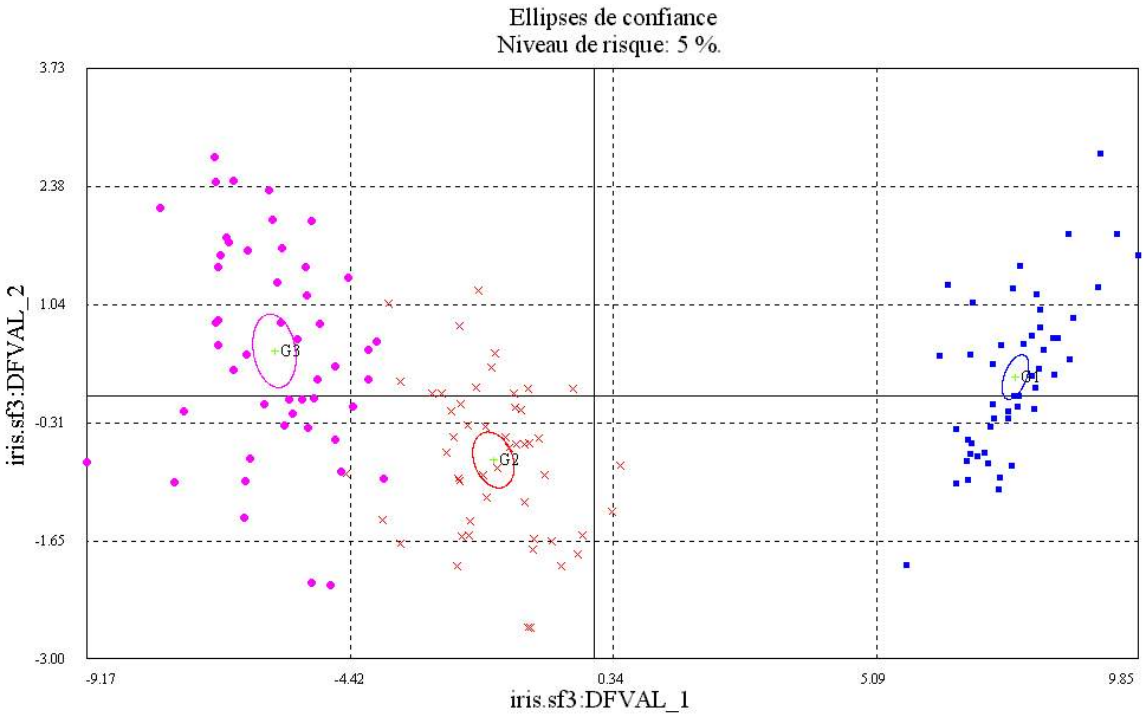
- Théorème central-limite
  - Pour n grand g suit approximativement une loi $N_p(\mu; \Sigma/n)$

- Ellipsoïde de confiance:
  - si Σ est connu

$$(\mathbf{g}-\boldsymbol{\mu})'\left(\frac{\boldsymbol{\Sigma}}{n}\right)^{-1}(\mathbf{g}-\boldsymbol{\mu}) \quad \text{suit une loi } \chi^2_p$$

- si Σ est inconnu: estimation par V matrice de variance-covariance de l'échantillon (n en dénominateur)
- La loi du khi-deux doit être remplacée par une F:

$$(\mathbf{g}-\boldsymbol{\mu})'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{g}-\boldsymbol{\mu}) = \frac{p}{n-p}F(p;n-p)$$



- **III. 2 Ellipsoïde de tolérance**: où se trouve une nouvelle observation?

$$(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})=k$$

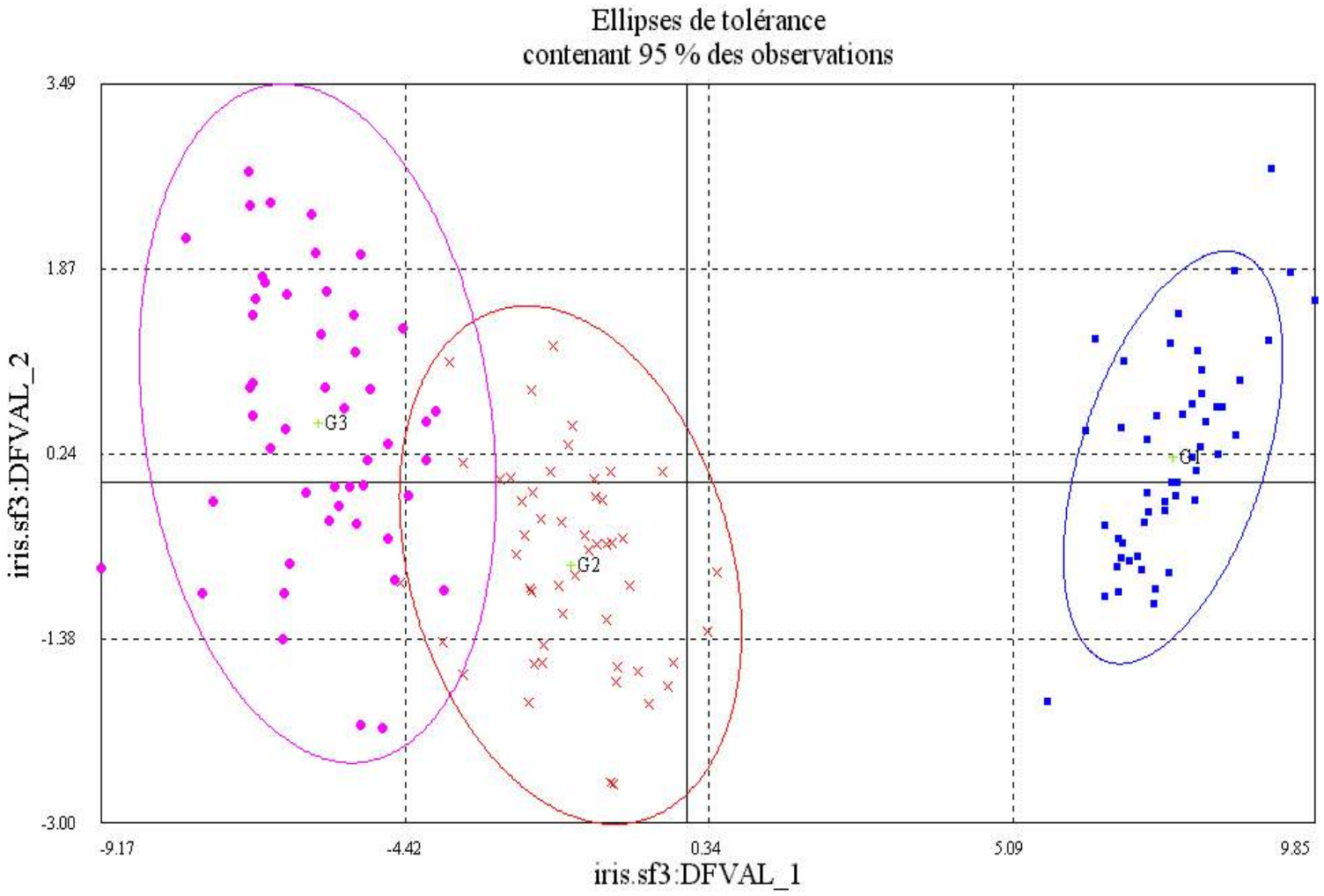
où k est le fractile 1-α d'un χ^2_p

- Si μ est estimé par g,

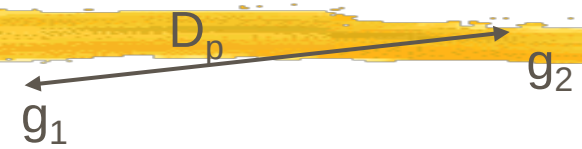
  x-g suit une $N_p\left(\mathbf{0};\boldsymbol{\Sigma}\left(1+\frac{1}{n}\right)\right)$

Si Σ estimé par la matrice de variance du nuage V:

$$(\mathbf{x}-\mathbf{g})'\mathbf{V}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{g})=\frac{(n-1)p}{n-p}\frac{n+1}{n}F(p;n-p)$$


Ellipses de tolérance
contenant 95 % des observations
3.49
1.87
0.24
-1.38
-3.00
iris.sf3:DFVAL_2
-9.17
-4.42
0.34
5.09
9.85
iris.sf3:DFVAL_1
G3
G2
G1

III.3 Distance de Mahalanobis



Distance au sens de la métrique W^{-1}.

$$\boxed{D_p^2 = (g_1 - g_2)' W^{-1} (g_1 - g_2)}$$

1. pour p=1 : $$\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}\left(\frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\hat{\sigma}}\right)^2 = \frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2} D_1^2 \sim F(1; n_1 + n_2 - 2)$$

2. p quelconque : $$D_p^2 = (g_1 - g_2)' W^{-1} (g_1 - g_2)$$
$$D_p^2 = (g_1 - g_2)' W^{-1/2} \underbrace{W^{-1/2} (g_1 - g_2)}_{W^{-1/2} X}$$

   - *Standardisation de chaque composante x_j*
   - *Décorrélation…*

Le Δ^2 théorique : $\Delta_p^2 = \left(\underline{\mu}_1 - \underline{\mu}_2\right)' \quad \Sigma^{-1}\left(\underline{\mu}_1 - \underline{\mu}_2\right)$

2 populations $N_p \left(\underline{\mu}_1, \Sigma\right)$ et $N_p \left(\underline{\mu}_2, \Sigma\right)$

D_p^2 estimation (biaisée) de Δ_p^2

$$W = \frac{n_1 V_1 + n_2 V_2}{n-2} = \hat{\Sigma}$$

$$D_p^2 = \left(\underline{g}_1 - \underline{g}_2\right)' W^{-1} \left(\underline{g}_1 - \underline{g}_2\right)$$

Test de comparaison de deux moyennes multivariées

$$E\left(D_p^2\right) = \frac{n-2}{n-p-1}\left(\Delta_p^2 + \frac{pn}{n_1 n_2}\right)$$

$$Si\ \Delta^2 = 0 \qquad \underline{\mu}_1 = \underline{\mu}_2$$

$$\frac{n_1 n_2}{n}\ \frac{n-p-1}{p(n-2)}\ \mathrm{D}_\mathrm{p}^2 \sim F\left(p; n-p-1\right)$$

Forme de Hotelling

$$\frac{n(n-2)}{n^2}(\mathbf{g_1} - \mathbf{g_2})'\mathbf{W}^{-1}(\mathbf{g_1} - \mathbf{g_2}) = T_p^2(n-2)$$

$$T_p^2(n) = \frac{np}{n-p+1}F(p; n-p+1)$$

2 groupes parmi k

- Théoriques :

$$\Delta_p^2 = \left(\mu_i - \mu_j\right)' \Sigma^{-1} \left(\mu_i - \mu_j\right)$$

- Estimées :

$$D_p^2 = \left(\underline{g}_i - \underline{g}_j\right)' \left(\frac{n}{n-k} W\right)^{-1} \left(\underline{g}_i - \underline{g}_j\right)$$

$$Si \quad \Delta^2 = 0$$

$$\frac{n_i n_j}{n_i + n_j} \cdot \frac{\text{n-k-p+1}}{(\text{n-k})\, p} \cdot D_p^2 = F\left(p; \text{n-k-p+1}\right)$$