

STATISTIQUE ET ANALYSE DES DONNÉES

MICHEL MAURIN

Métriques et sous-groupes de métriques dans l'analyse en composantes principales

Statistique et analyse des données, tome 16, n° 3 (1991), p. 127-142

http://www.numdam.org/item?id=SAD_1991__16_3_127_0

© Association pour la statistique et ses utilisations, 1991, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Statistique et analyse des données » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

METRIQUES ET SOUS-GROUPES DE METRIQUES DANS L'ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES

Michel MAURIN

Institut National de Recherche sur les Transports et leur Sécurité -
Laboratoire Energie Nuisances (INRETS-LEN), case 24,
69 675 BRON Cedex, FRANCE

Résumé : La note concerne les métriques euclidiennes dans l'espace des individus en Analyse en Composantes Principales (ACP). Après un rappel de la solution et une discussion sur l'unicité, il est présenté un moyen de générer des ensembles de métriques qui ont des structures de sous-groupe ; des propriétés tensorielles, de monotonie et de convexité de ces sous-groupes sont examinées.

Abstract : Metrics and metrics groups in Principal Components Analysis. The note deals with euclidean metrics in Principal Component Analysis (PCA). After a short recall on matricial solutions and their uniqueness (inherent and rather scarcely considered), a matricial way to get metrics is presented, which yields sub-groups of metrics. Further there is an investigation on tensorial and ordinal sub-groups properties (monotony and convexity) ; respective properties and definitions are recalled, ordinal properties are related to Loewner and/or Schur pre-orders.

Mots clefs : ACP, métrique, préordres de Loewner et de Schur

Keywords : PCA, euclidean metrics, Loewner and Schur pre-orders

Classification AMS : 62 H 25.

INTRODUCTION.

Dans la présentation à présent classique de l'Analyse en Composantes Principales, la mise en évidence du triplet de départ (X, Q, D) est un grand acquis qui permet d'explicitier les constituants de base et le rôle de chacun d'eux [Cailliez Pages]. En particulier Q est une métrique euclidienne dans l'espace des individus, et c'est avec elle que l'on exprime la proximité ou l'éloignement entre deux individus, "... (c'est la) définition précise du rôle que jouent les différentes variables dans l'appréciation de la ressemblance (entre individus)" [Escoufier 1985].

L'importance des métriques est reconnue par beaucoup, cependant les métriques utilisées sont en relativement faible quantité, et malgré des premières réflexions quant à leur choix et à quelques unes de leurs propriétés [Escoufier 1985, 86, 87, Maurin 1987, 90, 91] l'objet "métrique" du triplet de l'ACP n'a semble-t-il pas encore donné lieu à toutes les investigations qu'il mérite. Pour simplifier nous désignons par Q à la fois la métrique euclidienne et la matrice définie positive qui la représente, elle prend ses valeurs dans un cône convexe ouvert, et pour employer un langage de mécanicien (ou de statisticien) Q possède un "degré de liberté" dans le triplet. Cela signifie que les métriques qui sont susceptibles d'intervenir a priori dans une ACP sont "beaucoup" plus nombreuses que les seules métriques usuelles, ou celles qui sont proposées par les logiciels, et donc que leur cône mérite d'être exploré plus avant. Plus nous connaissons de propriétés du cône et des métriques, et plus l'éventail pour un choix concerté des métriques sera ouvert pour l'analyse et ses utilisations.

Pour commencer nous rappelons la solution d'un problème d'ACP en insistant sur l'option matricielle de la résolution, conforme en cela à la nature matricielle des métriques. Il s'agit là d'ailleurs d'un point de vue quasiment indispensable pour aborder avec commodité le degré de liberté de Q ainsi que d'autres problèmes attachés aux métriques [Maurin 87, 90, 91]. Nous en abordons brièvement quelques uns dans la mesure où nous les retrouvons dans la suite (la non unicité des solutions, la propriété tensorielle, le paramétrage des métriques) ; le coeur de l'exposé concerne une exploration du cône par l'intermédiaire de familles de métriques résultant de constructions matricielles relativement simples, avec l'examen des propriétés algébriques de ces familles. Nous obtenons des sous-groupes de métriques qui ont tous la métrique de Mahalanobis comme élément neutre, et nous observons dans certains sous-groupes des propriétés ordinales (de monotonie et de convexité) entre métriques qui sont liées à des préordres utiles en ACP à partir du spectre des valeurs propres.

D'une manière générale ces propos constituent un exemple de ce qui peut-être fait pour mener à bien l'examen plus étendu du cône des métriques, et parfaire ainsi notre connaissance des propriétés de Q et des solutions de (X, Q, D).

1 - RAPPELS ET COMPLEMENTS SUR L'ACP.

1.1 - Les données X(n,p) sont un tableau individus-variables, les colonnes X^j $j=1, \dots, p$ (supposées centrées par rapport à D) correspondent aux variables et les lignes X_i $i=1, \dots, n$ aux individus, les individus sont représentés dans l'espace individu euclidien $E = R^p$. Le triplet (X, Q, D) permet de construire la matrice de variance covariance $S = X' D X$ que nous supposons ici régulière pour simplifier ; l'ACP du triplet consiste à prendre pour nouvelle base dans E les directions principales ϕ_α $\alpha = 1, \dots, p$ qui sont les vecteurs propres Q-orthonormés de S Q. Nous prenons le point de vue matriciel et posons $\Phi(Q)$, ou Φ , la matrice des vecteurs colonnes ϕ_α , $\lambda(Q)$ le vecteur spectral des valeurs propres correspondantes λ_α de S Q, et $D_\lambda(Q)$ ou D_λ la matrice diagonale associée. Le couple $\{\Phi(Q), D_\lambda(Q)\}$ ou $\{\Phi, D_\lambda\}$ constitue la forme matricielle de la solution de l'ACP, ces matrices vérifient par construction les relations suivantes $S Q \Phi = \Phi D_\lambda$, $\Phi' Q \Phi = I$, et $\Phi' S^{-1} \Phi = D_\lambda^{-1}$ (deux d'entre elles entraînent la troisième) ; on remarque également que les matrices $Q^{1/2} \Phi$ et $S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2}$ sont orthogonales.

Le tableau $X Q \Phi$ est le tableau des valeurs prises par les composantes principales $\hat{\psi}_\alpha = X Q \phi_\alpha$ sur les individus, les éléments du carré d'Hadamard de $D^{1/2} X Q \Phi D_\lambda^{-1/2} = D^{1/2} X (\Phi D_\lambda^{1/2})^{-1}$, sont les contributions dites relatives des individus pour les inerties λ_α des directions principales [Volle] ; par conséquent deux triplets qui ont des métriques différentes mais qui présentent des $\Phi D_\lambda^{1/2}$ identiques ont les mêmes contributions relatives (nombreux exemples ci-après).

1.2 - A propos de l'unicité de la solution.

La solution d'une ACP (sous forme matricielle ou non) n'est pas unique [Maurin 1990] et il est pratiquement indispensable de connaître la classe $\{\Phi\}$ des solutions Φ pour mener l'étude des métriques. Nous rappelons brièvement quelques éléments de cette préoccupation, laquelle fait appel au formalisme algébrique [Calais, Maurin 1990, 91],

soient :

- D_x la matrice diagonale de vecteur diagonal $x \in \mathbb{R}^{+p}$;
- $\mathcal{O}_x^{\text{GL}}$ le sous-groupe stabilisateurs (ou d'isotropie) de la matrice D_x par la conjugaison dans $\text{GL}(p)$, (le groupe de matrices régulières qui commutent avec D_x) ;
- \mathcal{O}_N et \mathcal{O}_x les sous-groupes stabilisateurs des matrices symétriques N et D_x par la conjugaison dans $\text{O}(p)$, (les groupes de matrices orthogonales qui commutent respectivement avec N et D_x) ;
- $p_i^{n_i} \dots$ la signature de tout vecteur de \mathbb{R}^p , elle indique le nombre n_i des cas où p_i coordonnées sont égales entre elles, $\sum n_i p_i = p$ est le nombre de coordonnées, $\sum n_i \leq p$ est le nombre de valeurs distinctes ; quand toutes les coordonnées sont différentes la signature est 1^p , quand elles sont toutes égales la signature est p^1 .

Lemme 1.

Le sous-groupe \mathcal{O}_x est isomorphe au produit direct de $\sum n_i$ groupes orthogonaux $\text{O}(p_i)$.

En effet le sous-groupe orthogonal qui opère par conjugaison sur tout ensemble de p_i coordonnées égales est isomorphe à $\text{O}(p_i)$, et $\prod_i \text{O}(p_i)^{n_i}$ est isomorphe à un sous-groupe de \mathcal{O}_x ; réciproquement $\mathcal{O}_x - \ll \prod_i \text{O}(p_i)^{n_i} \gg$ est vide sinon (par l'absurde) tout élément de la différence ferait un "mélange" de sous-espaces propres différents.

Proposition 1.

Pour un spectre $\lambda(Q)$ fixé, le sous groupe $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ opère à droite sur l'ensemble des solutions Φ de l'ACP du triplet (X, Q, D) , et le sous groupe $\mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$ opère à gauche.

En effet :

i) soient les solutions de la forme $\Phi \mathcal{O}$, auquel cas $S Q \Phi \mathcal{O} = \Phi D_\lambda \mathcal{O} = \Phi \mathcal{O} D_\lambda$, ce qui entraîne que \mathcal{O} appartient à $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}^{\text{GL}}$; par ailleurs les matrices $Q^{1/2} \Phi \mathcal{O}$ et $S^{-1/2} \Phi \mathcal{O} D_\lambda^{1/2} = S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2} \mathcal{O}$ sont orthogonales si et seulement si \mathcal{O} est orthogonale.

Réciproquement si \mathcal{O} appartient à $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$, $\Phi \mathcal{O}$ est bien une solution pour le vecteur spectral $\lambda(Q)$.

ii) soient les solutions de la forme $\Omega \Phi$ avec Ω orthogonale. Dans ces conditions $Q^{1/2} \Omega \Phi$ est orthogonale, $(Q^{1/2} \Omega \Phi)' Q^{1/2} \Omega \Phi = \Phi' \Omega' Q \Omega \Phi$, $\Omega' Q \Omega = \Phi^{-1} \Phi^{-1} = Q$, ce qui entraîne que Ω appartient à \mathcal{O}_Q ; de la même façon $S^{-1/2} \Omega \Phi D_\lambda^{1/2}$ est orthogonale, $(S^{-1/2} \Omega \Phi D_\lambda^{1/2})' S^{-1/2} \Omega \Phi D_\lambda^{1/2} = D_\lambda \Phi' \Omega' S^{-1} \Omega \Phi D_\lambda = I$, $\Omega' S^{-1} \Omega =$

$\Phi^{-1} D_\lambda^{-1} \Phi^{-1} = S^{-1}$ ce qui entraine que Ω appartient à $\mathcal{O}_{S^{-1}} = \mathcal{O}_S$.

Réciproquement si Ω appartient à $\mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$ on a bien $\Omega S Q \Phi = S Q \Omega \Phi = \Omega \Phi D_\lambda$, avec $Q^{1/2} \Omega \Phi = \Omega Q^{1/2} \Phi$ et $S^{-1/2} \Omega \Phi D_\lambda^{1/2} = \Omega S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2}$ orthogonales. ♦

Remarques :

- i) $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ opère également à droite sur l'ensemble des $\Phi D_\lambda^{1/2}$ puisque $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ est aussi le stabilisateur de $D_\lambda^{1/2}$;
- ii) on peut aussi démontrer que $\mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$ et $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ sont deux sous-groupes conjugués et que les ensembles $\mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S \{ \Phi \} \mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ et $\{ \Phi \} \mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ sont identiques [Maurin 1990] ;
- iii) le sous-groupe D_ϵ des matrices diagonales d'éléments $\epsilon = \pm 1$ est inclus dans tout stabilisateur $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$, on retrouve ici le fait que les composantes principales ϕ_α peuvent être changées de signe ;
- iv) les autres solutions proviennent des vecteurs spectraux permutés $P \lambda(Q)$ pour toute matrice de permutation P du groupe $S(p)$ de substitution des coordonnées sur R^p . Plus précisément il faut introduire $S_{\lambda(Q)}$ le sous-groupe de substitution stabilisateur de $\lambda(Q)$ par opération à gauche de $S(p)$ et l'espace quotient $S(p)/S_{\lambda(Q)}$ des classes à gauche modulo $S_{\lambda(Q)}$; $S_{\lambda(Q)}$ est aussi un sous-groupe de $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ isomorphe à $\prod_i S(p_i)^{n_i}$ et à tout $S_{p\lambda(Q)}$. La solution générale est ainsi la réunion des classes $\cup_{\Pi} \{ \Phi_{\Pi}, D_{\Pi\lambda} \}$ obtenues avec les spectres respectifs $\Pi \lambda(Q)$, Π appartenant à $S(p)/S_{\lambda(Q)}$.

1.3 - Les propriétés tensorielles des métriques.

Par définition une métrique Q est dite tensorielle si et seulement si elle se comporte comme un tenseur symétrique d'ordre 2 deux fois covariant quand on effectue la transformation linéaire contravariante $Y_i = A^{-1} X_i$ sur les vecteurs individus pour tout A de $GL(p)$, c'est-à-dire $Y = X A^{-1}$ sur le tableau des données ; naturellement la matrice de covariance est un tenseur symétrique d'ordre 2 deux fois contravariant.

La qualité tensorielle des métriques est discutée dans [Maurin 1987], notamment on montre qu'avec une métrique tensorielle toute solution Φ est une fois contravariante et $D_{X\lambda}$ invariant, et que le fait d'être tensorielle pour une métrique apporte les clarifications dimensionnelles classiques de la Physique [Brillouin] dans l'espace des individus. Quelques unes des métriques connues sont des métriques tensorielles, les métriques des variables instrumentales [Bonifas et col., Mailles] ou celles des modèles à effets fixes [Besse et col.] par exemple.

1.4 - Le paramétrage des métriques.

Toute matrice symétrique définie positive B peut évidemment être mise sous la forme réduite $O D O'$ avec une matrice orthogonale O et une matrice diagonale D dont tous les éléments diagonaux sont positifs. En ACP il est plus pertinent de réduire la matrice $S^{1/2} Q S^{1/2}$, si $S^{1/2} Q S^{1/2} = \Omega D_\gamma \Omega'$, le vecteur diagonal γ est le vecteur des valeurs propres de SQ et Ω la matrice orthogonale $S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2}$ de l'ACP [Maurin 1991]. Les deux matrices Ω et D_γ sont des paramètres indépendants qui prennent leurs valeurs dans deux groupes $O(p)$ et R^{+p} ; par construction toutes les métriques qui ont la même valeur du paramètre Ω ont les mêmes contributions relatives.

2 - CONSTRUCTION DE FAMILLES DE METRIQUES.

2.1 - Des opérations matricielles.

A toute matrice diagonale Δ et toute application f définie sur R on fait correspondre la matrice diagonale $f(\Delta)$ dont les éléments diagonaux sont les $f(\delta_i)$. Pour toute matrice semblable $M = A \Delta A^{-1}$, A régulière, ses espaces propres sont engendrés par les vecteurs colonnes de A ; par construction la matrice $A f(\Delta) A^{-1}$ possède les mêmes espaces propres que M et les valeurs propres de $f(\Delta)$, par définition il s'agit de la matrice notée $f(M)$. Cette application possède les propriétés suivantes :

- i) pour tout couple d'applications f et g , $f(M) + g(M) = (f + g)(M)$, $f(M)$ et $g(M)$ commutent pour le produit matriciel $f(M).g(M) = (f.g)(M) = (g.f)(M)$ et $[f(M)]^{-1} = 1/f(M)$ si f ne s'annule pas sur le spectre de Δ ;
- ii) $f(g(M)) = (f \circ g)(M)$;
- iii) pour toute autre matrice semblable on a $f(B M B^{-1}) = B f(M) B^{-1}$.

Si B et C sont deux matrices réelles symétriques définies positives, le produit BC est semblable aux matrices symétriques $B^{1/2} C B^{1/2}$ et $C^{1/2} B C^{1/2}$ qui ont un spectre positif. Pour toute application f de R^+ dans R^+ l'application $f(BC)$ est donc égale à $B^{1/2} f(B^{1/2} C B^{1/2}) B^{-1/2}$ ou à $C^{-1/2} f(C^{1/2} B C^{1/2}) C^{1/2}$; en prenant par exemple $B^{1/2} C B^{1/2} = O \Delta O'$, alors $f(BC) = B^{1/2} O f(\Delta) O' B^{-1/2}$. Avec des matrices symétriques positives on a les compléments suivants, $B^{-1} f(BC)$, $f(BC) B$, $C f(BC)$ et $f(BC) C^{-1}$ sont symétriques positives; $[f(BC)]' = f(CB) = f((BC)'), f(BC) = B f(CB) B^{-1} = C^{-1} f(CB) C$, et naturellement $f(A BC A^{-1}) = A f(BC) A^{-1}$.

Dans le même ordre d'idée Pusz et Woronowicz et Carlin et Noble ont défini la moyenne géométrique $B \# C = B^{1/2} (B^{-1/2} C B^{-1/2})^{1/2} B^{1/2}$ elle-même symétrique et encore égale à $B (B^{-1} C)^{1/2}$ [Ando, Trapp]. Toutes ces définitions sont conformes entre elles, on a notamment $(BC)^{1/2} = B (B^{-1} \# C)$.

2.2 - Une famille de métriques attachées à Q.

Pour toute application f de R^+ dans R^+ nous posons ${}_fQ = S^{-1} f(S Q)$.

Proposition 2.

${}_fQ$ est une métrique ; lorsque f est bijective le triplet $(X, {}_fQ, D)$ conduit aux mêmes directions principales que le triplet (X, Q, D) , les mêmes sous-groupes matriciels opèrent sur les solutions des deux triplets.

En effet :

- i) $S {}_fQ$ possède les mêmes espaces propres que $S Q$ avec les valeurs propres $f(\lambda_\alpha)$ positives, par conséquent ${}_fQ$ est une métrique qui conduit aux mêmes directions principales que Q et au spectre $D_{f(\lambda)}$. Si $\{\Phi, D_\lambda\}$ est une solution de l'ACP de (X, Q, D) la quantité ${}_f\Phi = \Phi D_\lambda^{1/2} D_{f(\lambda)}^{-1/2}$ vérifie ${}_f\Phi' {}_fQ {}_f\Phi = I$ et ${}_f\Phi' S^{-1} {}_f\Phi = D_{f(\lambda)}^{-1}$, il en résulte que $\{{}_f\Phi, D_{f(\lambda)}\}$ est une solution de l'ACP de $(X, {}_fQ, D)$;
- ii) $S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2}$ est orthogonale et $S^{1/2} Q S^{1/2} = (S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2}) D_\lambda (S^{-1/2} \Phi D_\lambda^{1/2})'$; la métrique $S^{-1} f(S Q)$ se met donc également sous la forme ${}_fQ = S^{-1/2} f(S^{1/2} Q S^{1/2}) S^{-1/2} = S^{-1} \Phi D_\lambda^{1/2} D_{f(\lambda)} D_\lambda^{1/2} \Phi' S^{-1}$, invariante par l'action du groupes $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ qui est aussi un stabilisateur de $D_{f(\lambda(Q))}$ et de $D_\lambda D_{f(\lambda)}$ pour la conjugaison orthogonale ;
- iii) la métrique ${}_fQ$ est invariante par l'action du groupe $\mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$ puisque $\mathcal{O} {}_fQ \mathcal{O}' = \mathcal{O} S^{-1} \mathcal{O}' \mathcal{O} f(S Q) \mathcal{O}' = S^{-1} f(S Q)$ si $\mathcal{O} \in \mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$;
- iv) lorsque f est bijective $\mathcal{O}_{f(\lambda(Q))} = \mathcal{O}_{\lambda(Q)}$, $Q = S^{-1} f^{-1}(S {}_fQ)$ et $\mathcal{O} {}_fQ \cap \mathcal{O}_S = \mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$; ce sont donc les mêmes groupes $\mathcal{O}_{\lambda(Q)}$ et $\mathcal{O}_Q \cap \mathcal{O}_S$ qui opèrent respectivement à droite et à gauche sur l'ensemble des solutions ${}_f\Phi$ comme sur celui des solutions Φ .

Compléments : si Ω, D_γ est un jeu de paramètres pour Q (c'est-à-dire $S^{1/2} Q S^{1/2} = \Omega D_\gamma \Omega'$), alors $f(SQ) = S^{1/2} \Omega D_{f(\gamma)} \Omega' S^{-1/2}$; $\Omega, D_{f(\gamma)}$ est un jeu de paramètres pour ${}_fQ$, et ${}_f\Phi D_{f(\lambda)}^{1/2} = \Phi D_\lambda^{1/2}$. Par conséquent les ACP avec les métriques ${}_fQ$ conduisent à des

contributions relatives identiques à celles de Q .

Proposition 3.

Si Q est tensorielle la métrique ${}_f Q = S^{-1} f(S Q)$ est tensorielle ; c'est une condition nécessaire et suffisante quand f est bijective.

En effet quand on effectue la transformation $Y = X A^{-1}$ pour tout A de $GL(p)$ on a $S_Y = Y' D Y = A^{-1} S_X A'^{-1}$, et par hypothèse $Q_Y = A' Q_X A$. Par conséquent ${}_f Q_Y = S_Y^{-1} f(S_Y Q_Y) = A' S_X^{-1} A f(A^{-1} S_X Q_X A) = A' S_X^{-1} A A^{-1} f(S_X Q_X) A = A' {}_f Q_X A$. Quand f est bijective on a aussi $Q = S^{-1} f^{-1}(S {}_f Q)$. ♦

Dans ces conditions il en résulte donc les propriétés de transformation contravariante pour la solution ${}_f \Phi$ et d'invariance pour le spectre $f(\lambda)$ dus à la nouvelle métrique ${}_f Q$.

3 - DES SOUS-GROUPES DE METRIQUES.

3.1 - Les applications f de R^+ dans R^+ qui ne s'annulent pas (sauf éventuellement en 0 et $+\infty$) forment un groupe multiplicatif abélien avec l'application 1 comme élément neutre.

Soient l'ensemble des métriques ${}_f Q = S^{-1} f(S Q)$; quelle que soit Q , ${}_1 Q$ est la métrique S^{-1} et ${}_{id} Q$ la métrique Q .

Proposition 4 .

Les métriques ${}_f Q = S^{-1} f(S Q)$ construites avec les applications f d'un sous-groupe multiplicatif forment un groupe.

Soit la loi de composition ${}_f Q \perp {}_g Q$ qui à ${}_f Q$ et ${}_g Q$ fait correspondre ${}_{fg} Q = S^{-1} f(S Q) g(S Q) = {}_f Q S {}_g Q$. Le produit des applications fg est un élément du sous-groupe, la loi \perp est donc une loi interne avec l'élément neutre ${}_1 Q = S^{-1}$, régulière associative et commutative, et chaque métrique de l'ensemble ${}_f Q$ possède une inverse unique ${}_{1/f} Q$ pour la loi \perp . ♦

Proposition 5.

Dans les sous-groupes de métriques construits avec des applications f bijectives (hormis 1), tout élément peut être exprimé à partir de tout autre à l'exception de l'élément neutre.

En effet soient fQ et gQ deux métriques du groupe avec $f \neq 1$, on a $Q = S^{-1} f^{-1}(S fQ)$ d'où $gQ = S^{-1} g \circ f^{-1}(S fQ)$. ♦

3.2 - Un sous groupe particulier : Soit les applications puissances $f(.) = (.)^r$, r réel, et la famille de métriques $Q_r = S^{-1} (S Q)^r$ indiquée par r .

Quelle que soit Q , Q_1 est la métrique Q , Q_0 la métrique de Mahalanobis S^{-1} , et pour tout r entier positif Q_r est évidemment une métrique définie positive ; pour r réel on utilise la définition de la puissance d'un produit de deux matrices symétriques positives, si $BC = B^{1/2} \Delta O' B^{-1/2}$ les valeurs propres de $(BC)^r$ sont δ_i^r . Les relations 2.1 prennent ici la forme suivante :

$$i) (BC)^{r1} (BC)^{r2} = (BC)^{r1+r2} ; \quad ii) [(BC)^r]^p = (BC)^{rp} = (BC)^{pr} .$$

Proposition 6.

L'ensemble des métriques Q_r constitue un groupe abélien isomorphe au groupe additif des nombres réels.

En effet les applications $(.)^r$, r réel, forment un sous-groupe multiplicatif des applications de R^+ dans R^+ , isomorphe au groupe additif des réels, les métriques Q_r aussi. La loi de composition $Q_r \perp Q_s$ donne ici $S^{-1} (S Q)^r (S Q)^s = S^{-1} (S Q)^{r+s} = Q_{r+s}$, l'élément neutre est $Q_0 = S^{-1}$, l'inverse de Q_r est égal à Q_{-r} . ♦

Les métriques Q_r apparaissent en ACP avec r supérieur à 1 dans [Sabatier Jan Escoufier] ; $\{\Phi_r = \Phi D_\lambda^{-(r-1)/2}, D(r) = D_\lambda^r\}$ est une solution de l'ACP du triplet (X, Q_r, D) . Pour r différent de zéro l'application f est bijective, le sous-groupe stabilisateur $\mathcal{O}_{\lambda(Q_r)}$ est le même que celui de D_λ ; comme dans le cas général précédent $\Phi_r D(r)^{r/2}$ est égal à $\Phi D_\lambda^{1/2}$, toutes les métriques du groupe construites à partir d'une métrique Q conduisent à des contributions relatives identiques.

Corollaire de la proposition 4.

Soient Q_r et Q_s deux métriques du groupe avec $r \neq 0$, on a $S Q = (S Q_r)^{1/r}$ d'où

$$Q_s = S^{-1} (S Q)^s = S^{-1} [(S Q_r)^{1/r}]^s = S^{-1} (S Q_r)^{s/r} .$$

Pour toute métrique Q il y a un sous-groupe et un seul qui la contient, ce groupe est d'ordre infini si et seulement si la métrique Q est différente de S^{-1} .

Proposition 7.

Toutes les métriques du groupe construites à partir de la métrique Q sont tensorielles si et seulement si Q est tensorielle.

Pour r égal à zéro S^{-1} est tensorielle par construction ; pour r non nul les applications $f(.) = (.)^r$ sont bijectives. ♦

Proposition 8.

Tout ensemble de métriques Q_r construites à partir d'une métrique Q pour des indices r qui appartiennent à un sous-groupe du groupe additif des réels est un sous-groupe de métriques, ses métriques sont tensorielles si et seulement si Q est tensorielle.

La démonstration résulte des propositions précédentes. ♦

Remarque.

Dans cette famille nous avons $S Q_{1/2} = (SQ)^{1/2}$, par conséquent la matrice $Q_{1/2}$ est la moyenne géométrique ($S^{-1} \# Q$) de Q et de S^{-1} .

4 - PROPRIETES DE MONOTONIE ET DE CONVEXITE.

4.1 - Définitions de préordres.

Les constructions précédentes permettent d'obtenir des métriques fQ qui conduisent aux mêmes composantes orthogonales $S^{-1/2} f\Phi D_{f(\lambda)}^{1/2}$ et à des valeurs propres transformées $f\lambda_i = f(\lambda_i)$. Dans ce paragraphe nous introduisons des préordres entre métriques Q par l'intermédiaire des spectres $\lambda(Q)$ de SQ, dans certains cas ils conduisent à quelques résultats de monotonie et de convexité au sein de familles de métriques.

Dans ces définitions les éléments $a_{[i]}$ représentent la suite (finie) des a_i rangés par ordre de valeurs non croissantes.

Préordre 1 (de Loewner) .

Une métrique P domine une métrique Q au sens de Loewner si et seulement si les valeurs propres $\lambda_{[ij]}(P)$ de SP rangées par ordre non croissant sont supérieures ou égales aux valeurs propres $\lambda_{[ij]}(Q)$ de SQ de mêmes rangs ; on utilise la notation $P \geq_L Q$;

Préordre 2 (de Schur) .

Une métrique P domine une métrique Q au sens de Schur si et seulement si le spectre de SP divisé par sa trace $\lambda(P)/\text{trace}(SP)$ majorise le spectre analogue $\lambda(Q)/\text{trace}(SQ)$ obtenu avec la métrique Q ; les notations suivantes sont utilisées $\lambda(P)/\text{trace}(SP) > \lambda(Q)/\text{trace}(SQ)$ pour les vecteurs, $P >_{SM} Q$ pour les matrices ou les métriques, (note : le suffixe SM désigne "Schur Matriciel").

Le deuxième préordre est moins utilisé en ACP, on le rencontre par exemple pour comparer les variances des variables et le spectre de l'analyse [Critchley], mais il est cependant tout à fait adapté à l'interprétation d'une ACP qui envisage les parts d'inerties respectives de chaque direction principale rangées par parts décroissantes. Par exemple les métriques $P = D_{1/\sigma^2}$ et $Q = D_{1/\sigma} R D_{1/\sigma}$ vérifient $Q >_{SM} P$, avec σ^2 le vecteur diagonal principal de S (les variances des variables) et R la matrice de corrélation associée [Maurin 1987].

On rappelle la définition de la majorisation entre deux vecteurs dont les coordonnées ont la même somme : $a > b$ si et seulement si $\sum_{i=1..k} a_{[i]} \geq \sum_{i=1..k} b_{[i]}$, $k = 1, \dots, p-1$, et l'égalité pour $k = p$, ([Marshall Olkin] pour les résultats généraux, les théorèmes de Hardy Littlewood Polya, de Birkhoff, etc...). De manière plus générale, on définit le préordre $A >_{SM} B$ entre deux matrices à spectre réel positif par l'intermédiaire de la définition de la majorisation vectorielle appliquée aux spectres divisés par leur trace : $\gamma(A)/\text{trace}(A) > \gamma(B)/\text{trace}(B)$. Il existe quelques résultats relatifs à ce préordre, par exemple le théorème de Ky Fan et de Mirsky énonce que $A >_{SM} \text{Diag}(A)$ pour A symétrique positive [Marshall Olkin], et dans [Bapat Sunder] figurent quelques conditions sous lesquelles on démontre $A >_{SM} B$. Nous utilisons ici la condition suffisante suivante pour les matrices A et B symétriques définies positives :

Lemme 2 .

Si la suite $\gamma_{[ij]}(A) / \gamma_{[ij]}(B)$ est non croissante alors $A >_{SM} B$.

Pour alléger l'écriture nous posons $\gamma_{[j]}(A) = a_j$, $\gamma_{[j]}(B) = b_j$; puisque on a $a_j/b_j \geq a_i/b_i$ pour $j > i$ il en résulte que $a_j b_i \geq a_i b_j$ et la relation suivante :

$$\sum_{i=1 \dots k} a_i \sum_{j=k+1 \dots p} b_j \geq \sum_{i=1 \dots k} b_i \sum_{j=k+1 \dots p} a_j, \quad k = 1 \dots p-1.$$

En ajoutant $\sum_{i=1 \dots k} a_i \sum_{i=1 \dots k} b_i$ aux deux membres nous obtenons :

$$\frac{\sum_{i=1 \dots k} a_i}{\sum_{i=1 \dots k} a_i + \sum_{j=k+1 \dots p} a_j} \geq \frac{\sum_{i=1 \dots k} b_i}{\sum_{i=1 \dots k} b_i + \sum_{j=k+1 \dots p} b_j} \text{ pour } k = 1, \dots, p-1 \text{ et l'égalité pour } k =$$

p. ♦

4.2 - Des propriétés de monotonie.

Proposition 9.

Si f et g sont deux applications positives monotones simultanément non décroissantes ou non croissantes et telles que $f \geq g$, la relation suivante est vérifiée $fQ \geq_L gQ$.

En effet les suites $f(\lambda_{[i]}(Q))$ et $g(\lambda_{[i]}(Q))$ varient de la même façon, avec $f(\lambda_{[i]}(Q)) \geq g(\lambda_{[i]}(Q))$ pour tout indice i . ♦

Proposition 10.

Si f , g et f/g sont des applications positives simultanément non décroissantes ou non croissantes, la relation suivante est vérifiée : $fQ >_{SM} gQ >_{SM} 1Q$.

La suite $\lambda_{[i]}(Q)$ est non croissante et la suite $\lambda_{[p-i+1]}(Q)$ non décroissante en i . Dans le premier cas, la suite $f(\lambda_{[i]}(Q)) / g(\lambda_{[i]}(Q))$ est non croissante en i ; dans le second cas, $f(\lambda_{[p-i+1]}(Q)) / g(\lambda_{[p-i+1]}(Q))$ est non croissante en i . ♦

Corollaire .

Le groupe des métriques Q_r vérifie $Q_r >_{SM} Q_s >_{SM} Q_0$ pour $r \geq s \geq 0$ et $r \leq s \leq 0$.

Exemple : nous reprenons les métriques $P = D_{1/\sigma^2}$ et $Q = D_{1/\sigma} R D_{1/\sigma}$, la première donne $S P = D_\sigma R D_{1/\sigma}$ et $S P_r = (D_\sigma R D_{1/\sigma})^r$, la seconde $S Q = (D_\sigma R D_{1/\sigma})^2$ et $S Q_r = (D_\sigma R D_{1/\sigma})^{2r}$; il en résulte que $P_{2r} = Q_r$, que les métriques P_r et Q_r appartiennent

à une même famille et donc qu'elles conduisent aux mêmes contributions relatives ; en dernier on a $Q_r \succ_{SM} P_r$ pour tout r réel, ce résultat généralise celui du cas $r = 1$ rappelé en 4.1.

4.3 - Des propriétés de convexité.

Proposition 11.

L'ensemble des métriques fQ attachées à une métrique Q forment un cône convexe positif.

En effet si fQ et gQ sont deux métriques, leur somme est la métrique $f+gQ = g+fQ$ puisque $f(SQ) + g(SQ) = (f+g)(SQ) = (g+f)(SQ)$, et pour tout c positif $c fQ = c_f Q$ est une autre métrique. ♦

Cela constitue une seconde structure algébrique pour ces ensembles de métriques. Par ailleurs toutes les métriques d'un même cône conduisent aux mêmes espaces propres, il est donc simple de les comparer selon les préordres précédents dans le cas où les différentes applications $f(.)$ en jeu sont simultanément croissantes ou décroissantes.

Pour les sous-groupes Q_r nous envisageons de comparer les métriques construites avec les applications $c (.)^r + d (.)^s$ et $(.)^{cr+ds}$, c et d positifs ou nuls de somme égale à 1.

Proposition 12.

Pour r et s de même signe et c et d positifs ou nuls de somme égale à 1, la relation $c Q_r + d Q_s \geq_L Q_{cr+ds}$ est vérifiée.

En effet $(.)^r$, $(.)^s$ et $(.)^{cr+ds}$ varient de la même façon pour r et s de même signe, et il s'agit pour tout i de comparer $c \lambda_i^r + d \lambda_i^s$ et λ_i^{cr+ds} . Les applications $\lambda^{(.)}$, $\lambda > 0$ sont positives convexes sur R , par conséquent la relation $c \lambda_i^r + d \lambda_i^s \geq \lambda_i^{cr+ds}$ est vérifiée pour tout i . ♦

Nous envisageons à présent les métriques T telles que les valeurs propres de $S T$ sont simultanément supérieures ou égales à 1, ou inférieures ou égales à 1, auquel cas toutes les métriques T_i du sous-groupe associé vérifient la même propriété.

Lemme 3.

L'application φ qui à x positif ou nul et c et d positifs ou nuls de somme égale à 1 fait correspondre $\frac{x^{cr+ds}}{c x^r + d x^s}$ est décroissante pour x supérieur ou égal à 1, et croissante pour x positif ou nul, inférieur ou égal à 1.

En effet la dérivée de φ est du signe de $cd(r-s)(x^s - x^r)$. ♦

Proposition 13.

Pour r et s de même signe et c et d positifs ou nuls de somme égale à 1, la relation $c T_r + d T_s >_{SM} T_{cr+ds}$ est vérifiée pour les métriques T qui conduisent à un spectre supérieur ou égal à 1, la relation $T_{cr+ds} >_{SM} c T_r + d T_s$ est vérifiée pour les métriques T qui conduisent à un spectre positif inférieur ou égal à 1.

En effet avec r et s positifs ou nuls et un spectre $\lambda(T)$ supérieur ou égal à 1, les spectres $\lambda(T_r)$, $\lambda(T_s)$ et $\lambda(T_{cr+ds})$ sont eux-mêmes supérieurs ou égaux à 1, les suites $c \lambda_{[i]}^r + d \lambda_{[i]}^s$ et $\lambda_{[i]}^{cr+ds}$ sont non croissantes en i ainsi que la suite $1/\varphi(\lambda_{[i]})$; avec un spectre $\lambda(T)$ compris entre 0 et 1, les spectres $\lambda(T_r)$, $\lambda(T_s)$ et $\lambda(T_{cr+ds})$ sont eux-mêmes compris entre 0 et 1, les suites $c \lambda_{[i]}^r + d \lambda_{[i]}^s$ et $\lambda_{[i]}^{cr+ds}$ sont non croissantes en i , ainsi que la suite $\varphi(\lambda_{[i]})$.

Avec r et s négatifs ou nuls et un spectre $\lambda(T)$ supérieur ou égal à 1, les spectres $\lambda(T_r)$, $\lambda(T_s)$ et $\lambda(T_{cr+ds})$ sont compris entre 0 et 1, les suites $c \lambda_{[p-i+1]}^r + d \lambda_{[p-i+1]}^s$ et $\lambda_{[p-i+1]}^{cr+ds}$ sont non croissantes en i , ainsi que la suite $1/\varphi(\lambda_{[p-i+1]})$; avec un spectre $\lambda(T)$ compris entre 0 et 1, les spectres $\lambda(T_r)$, $\lambda(T_s)$ et $\lambda(T_{cr+ds})$ sont supérieurs ou égaux à 1, les suites $c \lambda_{[p-i+1]}^r + d \lambda_{[p-i+1]}^s$ et $\lambda_{[p-i+1]}^{cr+ds}$ sont non croissantes en i , ainsi que la suite $\varphi(\lambda_{[p-i+1]})$. ♦

Remarque : les spectres attachés aux métriques $Q^* = Q/(\text{tr } SQ)$ sont compris entre 0 et 1, $Q_r^* = S^{-1}(SQ^*)^r = Q_r/(\text{tr } SQ)^r$, on a donc la relation $Q_{cr+ds}^*/(\text{tr } SQ)^{cr+ds} >_{SM} c Q_r^*/(\text{tr } SQ)^r + d Q_s^*/(\text{tr } SQ)^s$ pour r et s de même signe.

REFERENCES

- Ando T., 1979, *Concavity of certain maps on positive definite matrices and applications to Hadamard products*, Linear algebra and its applications, 26, 203-241.
- Bapat R.B., Sunder V.S., 1985, *On majorization and Schur products*, Linear algebra and its applications, vol 72, 107-117.
- Besse P., Caussinus H., Ferre L., Fine J., 1986, *Some guidelines for principal component analysis*, Compstat 86, Physica-Verlag, Heidelberg, 23-30.
- Bonifas L., Escoufier Y., Gonzalez R., Sabatier R., 1984, *Choix de variables en ACP*, Revue de Statistique Appliquée, XXXII n° 2, 5-15.
- Brillouin L., 1960, *Les tenseurs en Mécanique et en Elasticité*, Masson.
- Cailliez F., Pages J.P., 1976, *Introduction à l'analyse des données*, SMASH.
- Calais J., 1984, *Eléments de théorie des groupes*, PUF.
- Critchley F., 1988, *Principal component analysis : some majorization, perturbation and nonnegative matrix theory*, Statistique et Analyse des Données, vol 13 n° 1, 8-14.
- Escoufier Y., 1985, *Trois exposés sur la Statistique*, rapport technique 8508, ENSAM-INRA-USTL.
- Escoufier Y., 1986, *A propos du choix des variables en analyse des données*, Metron, 31-47.
- Escoufier Y., 1987, *Numéro spécial sur le "Choix de métriques"*, Statistique et Analyse des Données, vol 12 n° 3, voir le volume complet.
- Mailles J.P., 1980, *Analyse des tableaux de proximités*, Cahier du Buro n° 33.
- Marshall A.W., Olkin I., 1979, *Inequalities : theory of majorization and its applications*, Academic Press.
- Maurin M., 1987, *Sur les qualités des métriques en ACP*, Statistique et Analyse des Données vol 12 n° 3, 58-74.

- Maurin M.**, 1990, *La non-unicité des solutions en ACP et son application au changement de métriques*, Metron, vol. XLVIII - N. 1-4, 533-557.
- Maurin M.**, 1991, *Un paramétrage des métriques en ACP, applications et conséquences*, XXIII Journées de Statistique, Strasbourg 1991, 358-360.
- Sabatier R.**, Jan Y., Escoufier Y., 1984, *Approximations d'applications linéaires et Analyse en composantes principales*, dans Diday et al.: Data Analysis and Informatics III, North-Holland, 569-580.
- Trapp G.E.**, 1984, *Hermitian semidefinite matrix means and related matrix inequalities - an introduction*, Linear and multilinear algebra, vol 16, 113-123.
- Volle M.**, 1981, *Analyse des données*, Economica.