

Investigating control-centred results after uncentred principal component analysis

Analyse des résultats centrés sur le contrôle après une analyse en composantes principales non centrée

John Castura

Compusense Inc.
Canada

Véronique Cariou

Oniris, INRAE, StatSC
France

Tormod Næs

Nofima AS
Norway

Statistical Society of Canada
2025 Annual Meeting in Saskatoon

La Société statistique du Canada
Congrès annuel de la SSC 2025 à Saskatoon





PCA ACP

Data matrix
Matrice de données



PCA ACP

Data matrix
Matrice de données



=

Score matrix
Matrice des scores



Loading matrix
Matrice des poids



PCA ACP

Data matrix
Matrice de données



=

Score matrix
Matrice des scores

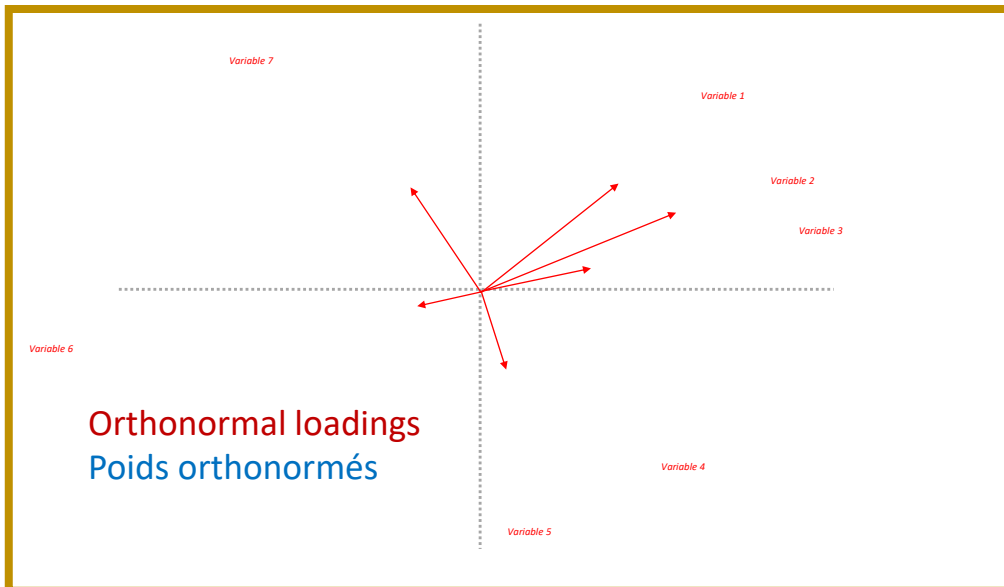


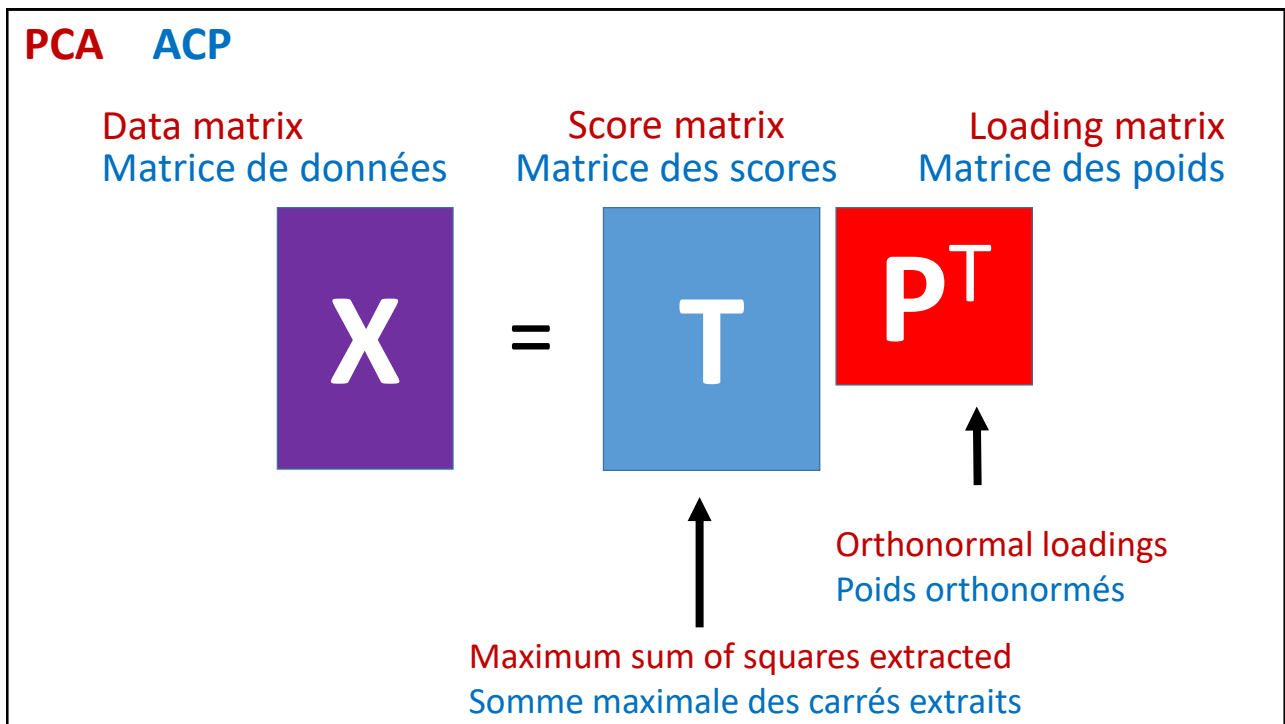
Loading matrix
Matrice des poids



Orthonormal loadings
Poids orthonormés

PCA ACP





Centred PCA

ACP centrée

$$\mathbf{X} = \mathbf{T} \mathbf{P}^T$$

Centred PCA extracts maximum variance from **X** in successive PCs

L'ACP **centrée** extrait la variance maximale de **X** dans les PC successifs

Suppose variance in **X** is not of primary importance...

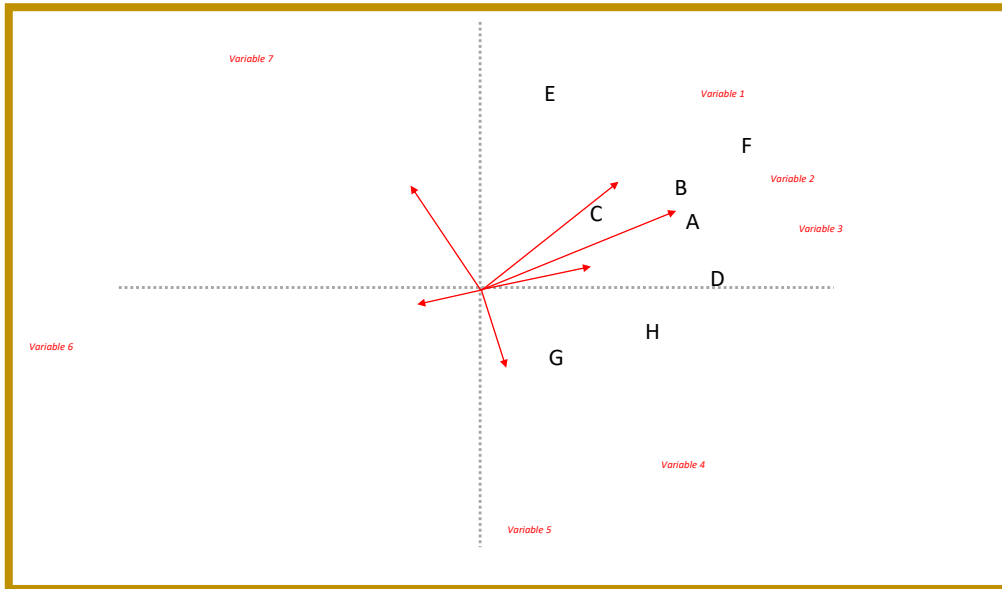
We used **uncentred PCA** to explore variability of only **a subset of paired differences** in **X**.

Supposons que la variance de **X** ne soit pas d'une importance primordiale...

Nous allons utiliser une **ACP non centrée** pour explorer la variabilité d'un **sous-ensemble seulement des différences entre paires** dans **X**.

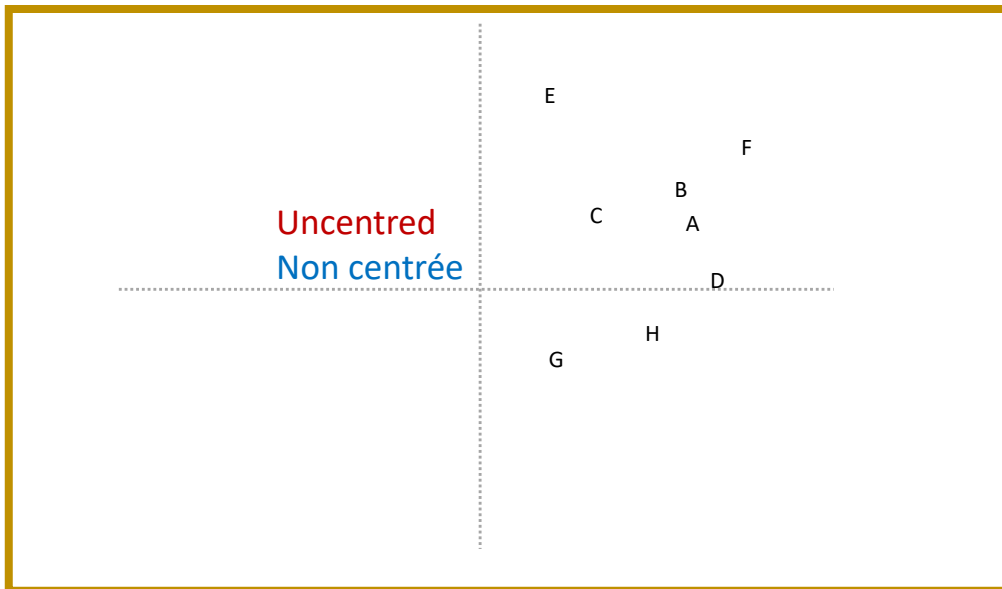
Uncentred PCA

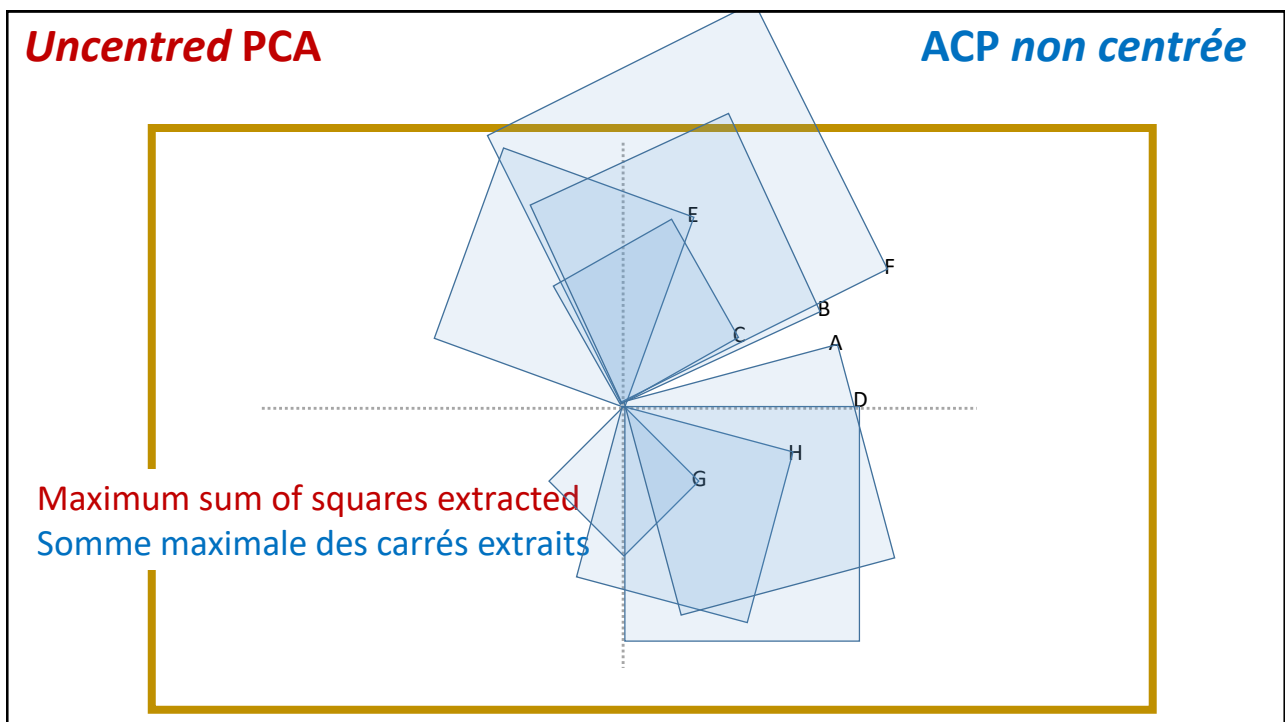
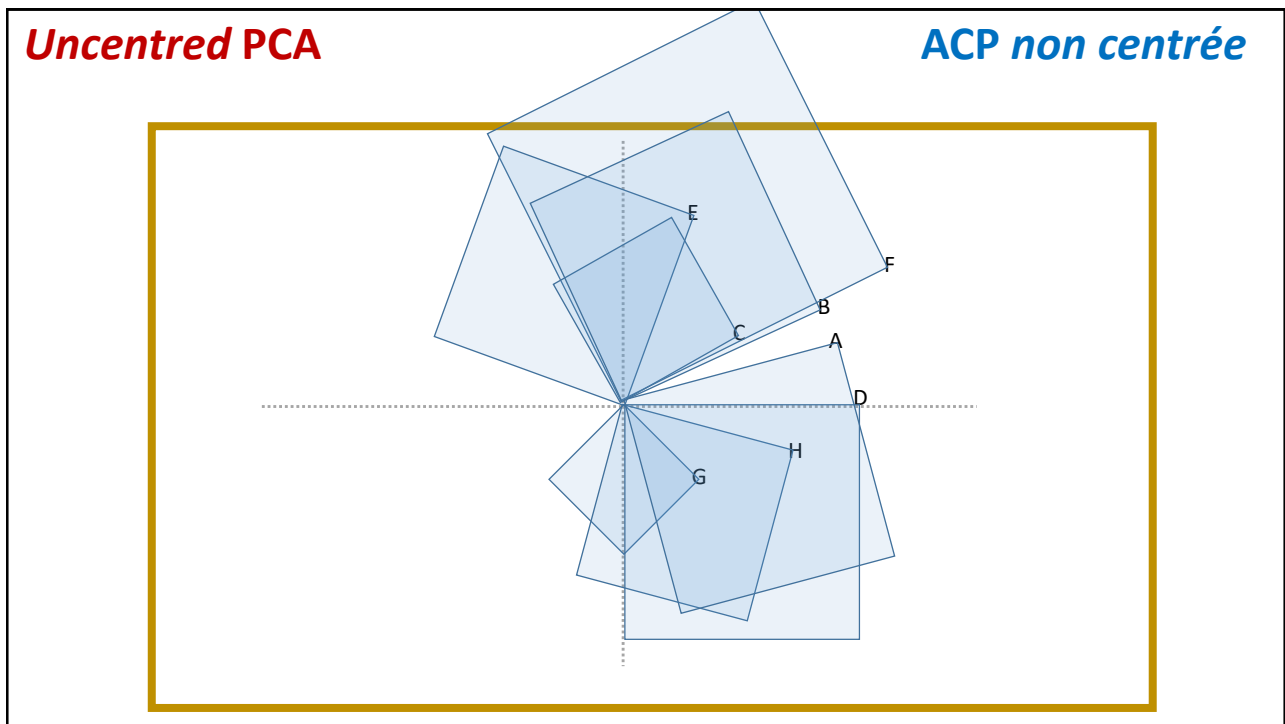
ACP non centrée



Uncentred PCA

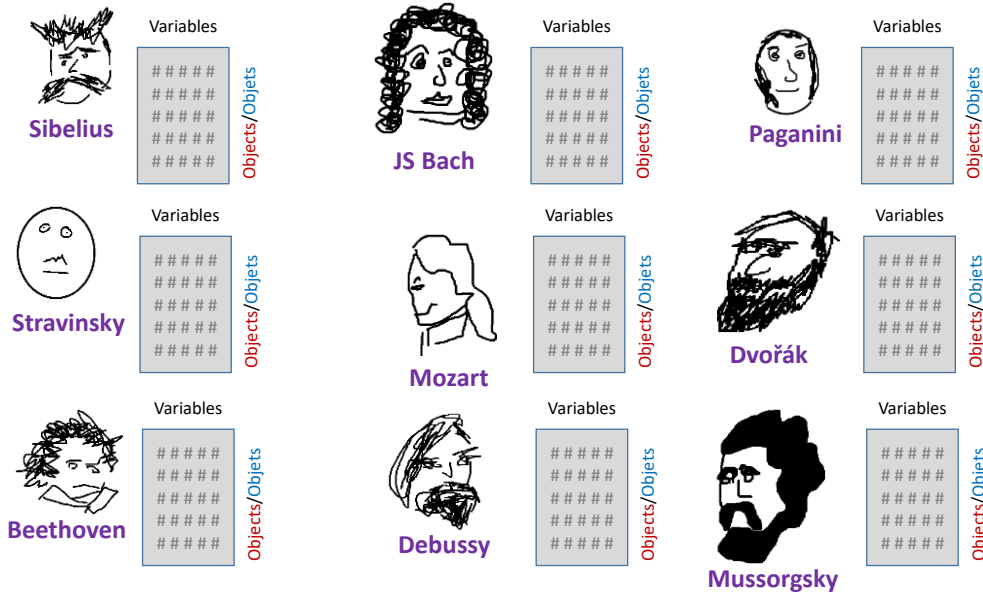
ACP non centrée





Responses from a trained sensory panel

Réponses d'un panel sensoriel entraîné



Data matrix

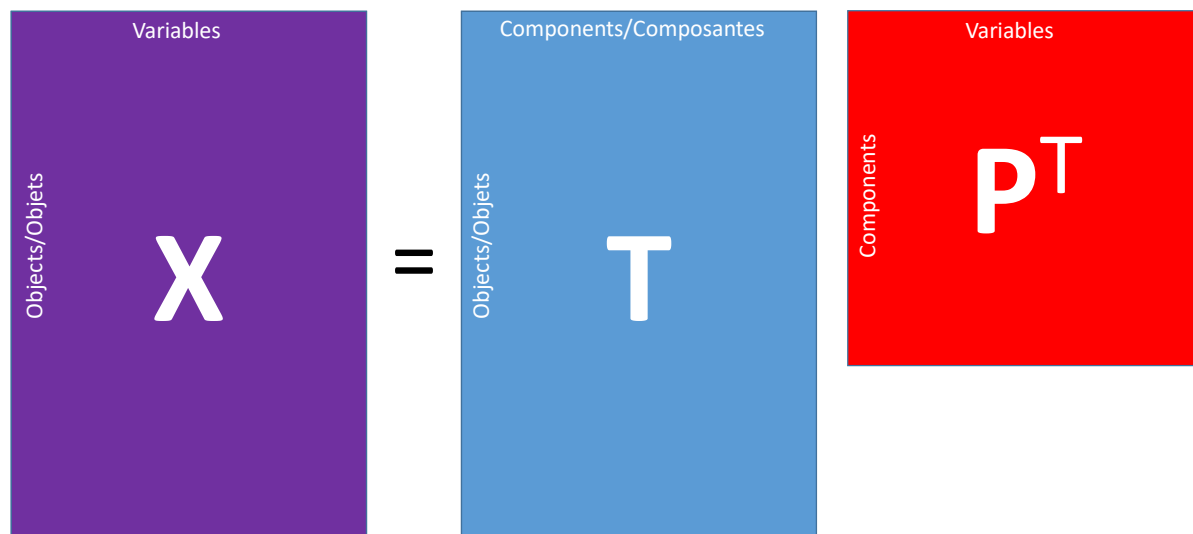
Matrice de données



1. Get table of means.
Obtenir le tableau des moyennes.
2. Drop non-discriminating variables.
Supprimer les variables non discriminantes.
3. Centre and variance-standardize columns.
Centrer et réduire les variables.

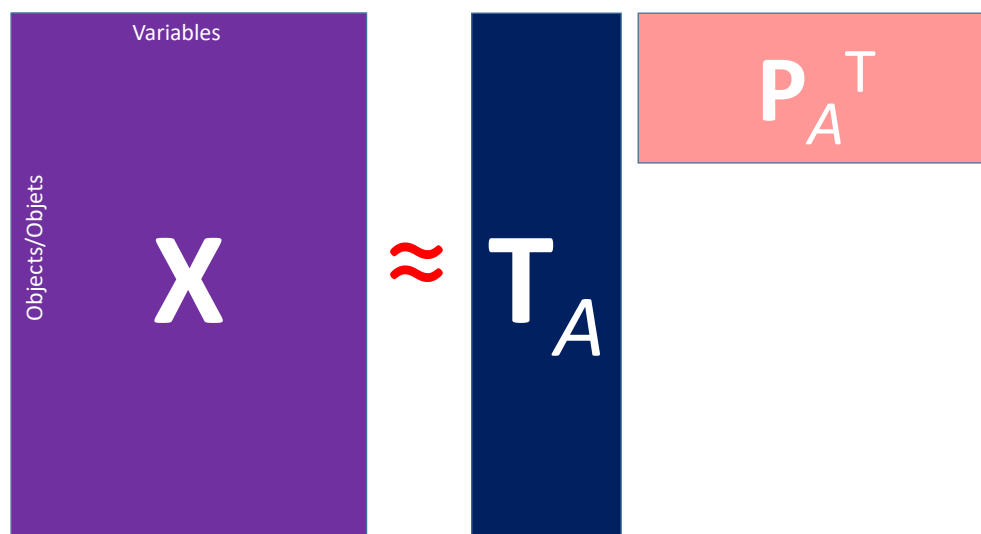
Principal component analysis

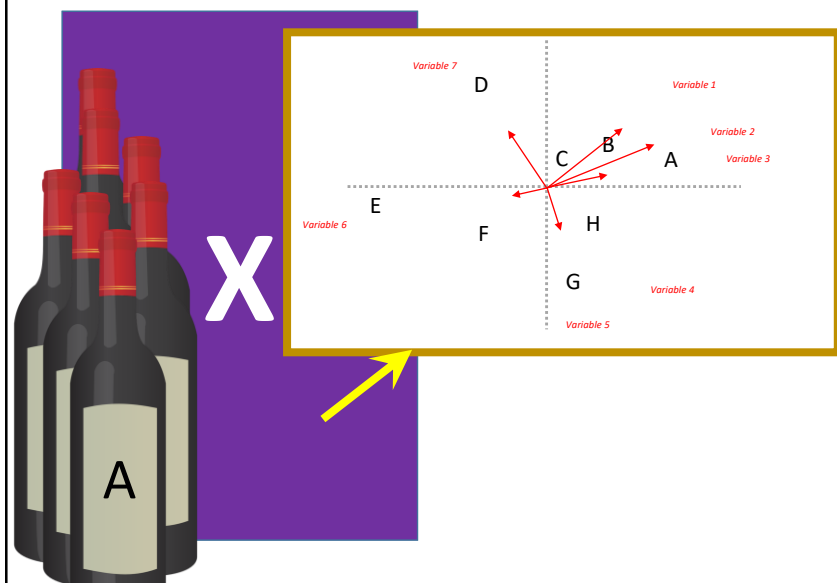
Analyse en composantes principales



Dimension Reduction to A PCs

Réduction des dimensions à A CPs





Paired Comparisons after PCA Comparaisons par paires après l'ACP

Castura, J.C., Varela, P., & Næs, T. (2022). Investigating paired comparisons after principal component analysis. *Food Quality and Preference*, 106, 104814.

<https://doi.org/10.1016/j.foodqual.2023.104814>

“Crossdiff-unfolding”

“Dépliage croisé”

X

column-centered ($J \times M$) matrix
matrice centrée sur les colonnes ($J \times M$)

$X \ominus X$

Every row is subtracted
from every row
Chaque ligne est soustraite
de toutes les autres lignes

column-centered ($J^2 \times M$) matrix
matrice centrée sur les colonnes ($J^2 \times M$)

“Crossdiff-unfolding”

“Dépliage croisé”

X

The covariance
matrix of X and the
covariance matrix of
 $X \ominus X$ are identical
except for a
multiplier.

$X \ominus X$

La matrice de
covariance de X et
la matrice de
covariance de $X \ominus X$
sont identiques à un
coefficient
multiplicateur près.

Key relationships

PCA of X / ACP de X

$$X = \text{[blue rectangle]} P^T$$

Relations essentielles

PCA of $X \ominus X$ / ACP de $X \ominus X$

$$X \ominus X = \text{[blue rectangle]} P^T$$

Key relationships

PCA of X / ACP de X

$$X = \text{[blue rectangle]} P^T$$

1. Loading matrices from both solutions are identical.
Les matrices de poids des deux solutions sont identiques.

Relations essentielles

PCA of $X \ominus X$ / ACP de $X \ominus X$

$$X \ominus X = \text{[blue rectangle]} P^T$$

Key relationships

PCA of X / ACP de X

$$X = T P^T$$

2.

Crossdiff-unfolding scores from PCA of X gives scores from PCA of $X \ominus X$.

L'unfolding de la matrice croisée des scores de l'ACP de X est égale à la matrice des scores de l'ACP de $X \ominus X$.

Relations essentielles

PCA of $X \ominus X$ / ACP de $X \ominus X$

$$X \ominus X = T \ominus T P^T$$

PCA of objects
and
PCA of all paired
comparisons of objects
are equivalent

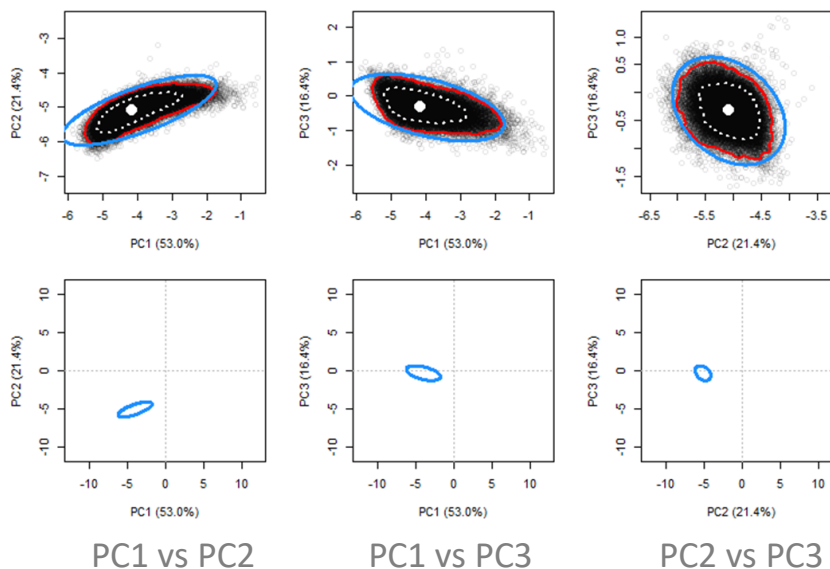
ACP des objets
et
ACP de toutes les
comparaisons par
paires d'objets
sont équivalentes

Uncertainty in paired comparisons after PCA

Incertitude dans les comparaisons par paires après l'ACP

Castura, J.C., Varela, P., & Næs, T. (2023) Evaluation of complementary numerical and visual approaches for investigating pairwise comparisons after principal component analysis. *Food Quality and Preference*, 107, 104843.
<https://doi.org/10.1016/j.foodqual.2023.104843>

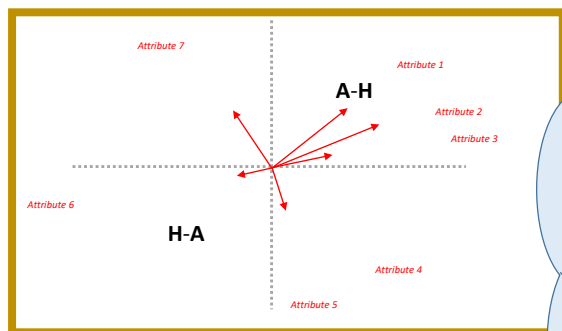
Ellipsoidal approximation of the uncertainty cloud Approche ellipsoïdale du nuage d'incertitude



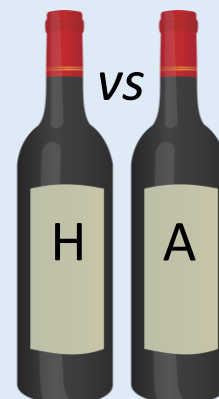
Suppl. Fig. 1a from Castura, Varela & Næs (2023a) used with permission.
All rights reserved.

Sensory evaluation

Évaluation sensorielle

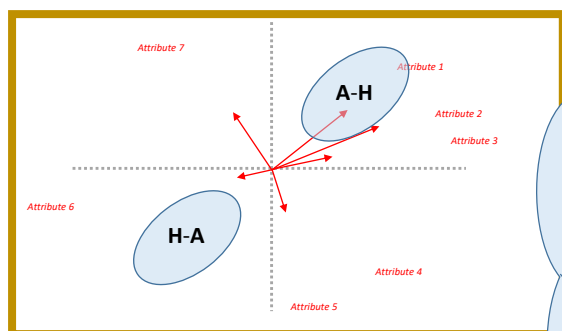


Mussorgsky

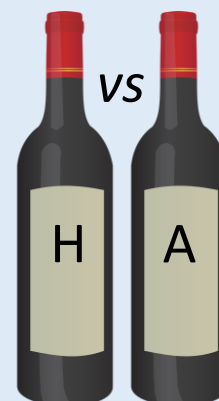


Sensory evaluation

Évaluation sensorielle

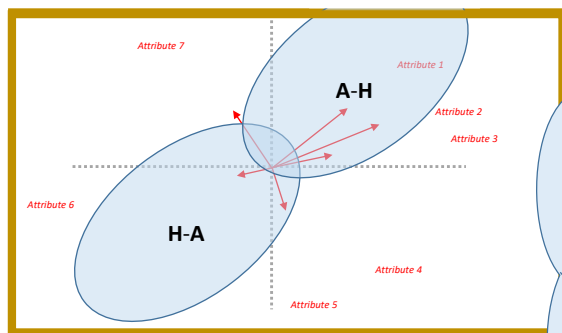


Mussorgsky

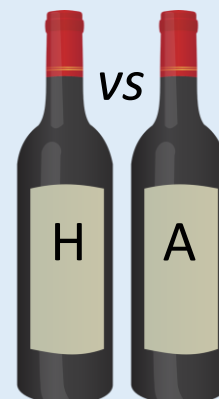


Sensory evaluation

Évaluation sensorielle

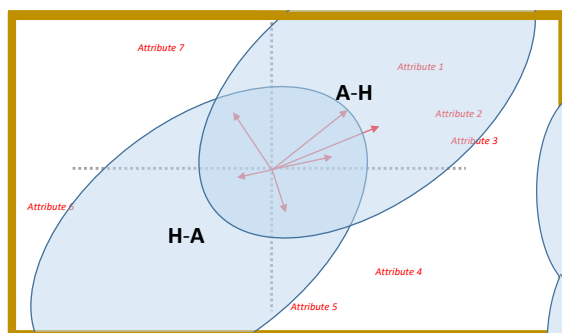


Mussorgsky

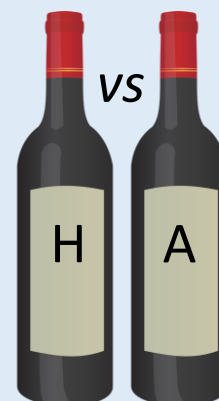


Sensory evaluation

Évaluation sensorielle



Mussorgsky





New!

Investigating a subset of paired comparisons after PCA

Étude d'un sous-ensemble
de comparaisons par paires
après l'ACP

Castura, J.C., Varela, P., & Næs, T. (2023). Investigating only a subset of paired comparisons after principal component analysis. *Food Quality and Preference*, 110, 104941.
<https://doi.org/10.1016/j.foodqual.2023.104941>

Investigating a subset of paired differences after uncentred PCA

Étude d'un sous-ensemble
de différences par paires
après l'ACP non centrée

Castura, J.C., Cariou, V., & Næs, T. (2025). Investigating control-centred results after uncentred principal component analysis. *Zenodo*. (Pre-print.)
<https://doi.org/10.5281/zenodo.15073361>

Investigating only a subset of paired comparisons

L'étude d'un sous-ensemble de comparaisons par paires

“...the interrelationships between the variables might be different for the subset of paired comparisons than it is for all paired comparisons. So the covariance matrix for a matrix of all paired comparisons and the covariance matrix of selected paired comparisons will differ depending on the data.”

« Les relations entre les variables peuvent être différentes pour le sous-ensemble de comparaisons par paires que celles pour l'ensemble des comparaisons. Ainsi, la matrice de covariance associée à toutes les comparaisons par paires et celle associée aux paires sélectionnées seront différentes en fonction des données. »

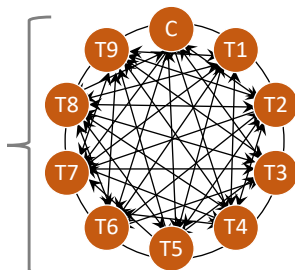
Castura, J.C., Varela, P., & Næs, T. (2023). Investigating only a subset of paired comparisons after principal component analysis. *Food Quality and Preference*, 110, 104941.

1 Control & 9 Test Products

1 contrôle et 9 produits de test

All Pairs Toutes les paires

C=45 paired comparisons
C=45 comparaisons par paires

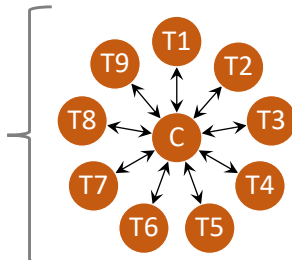


$$X \ominus X$$

$$J^2 = 100 \begin{matrix} \text{rows} \\ \text{lignes} \end{matrix}$$

Test-Control Pairs Paires test-contrôle

C=9 paired comparisons
C=9 différences entre paires

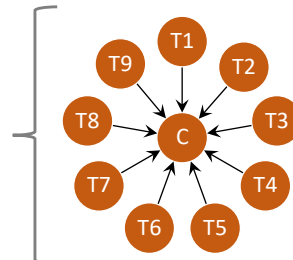


$$\Delta^*$$

$$2C = 18 \begin{matrix} \text{rows} \\ \text{lignes} \end{matrix}$$

Test-Control Differences Différences test-contrôle

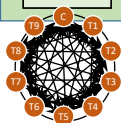
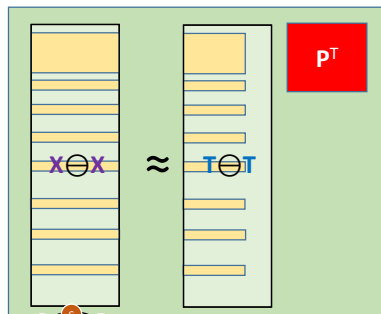
C=9 paired comparisons
C=9 différences entre paires



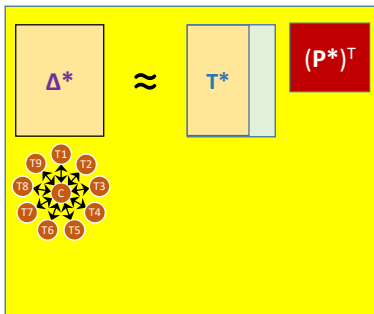
$$X^C$$

$$C+1 = 10 \begin{matrix} \text{rows} \\ \text{lignes} \end{matrix}$$

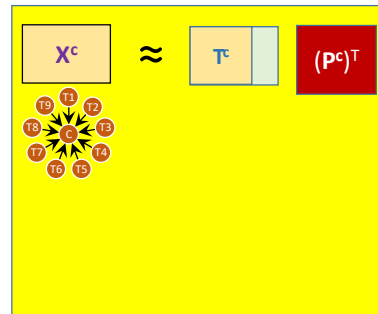
Centred PCA of ACP centrée de $X \ominus X$

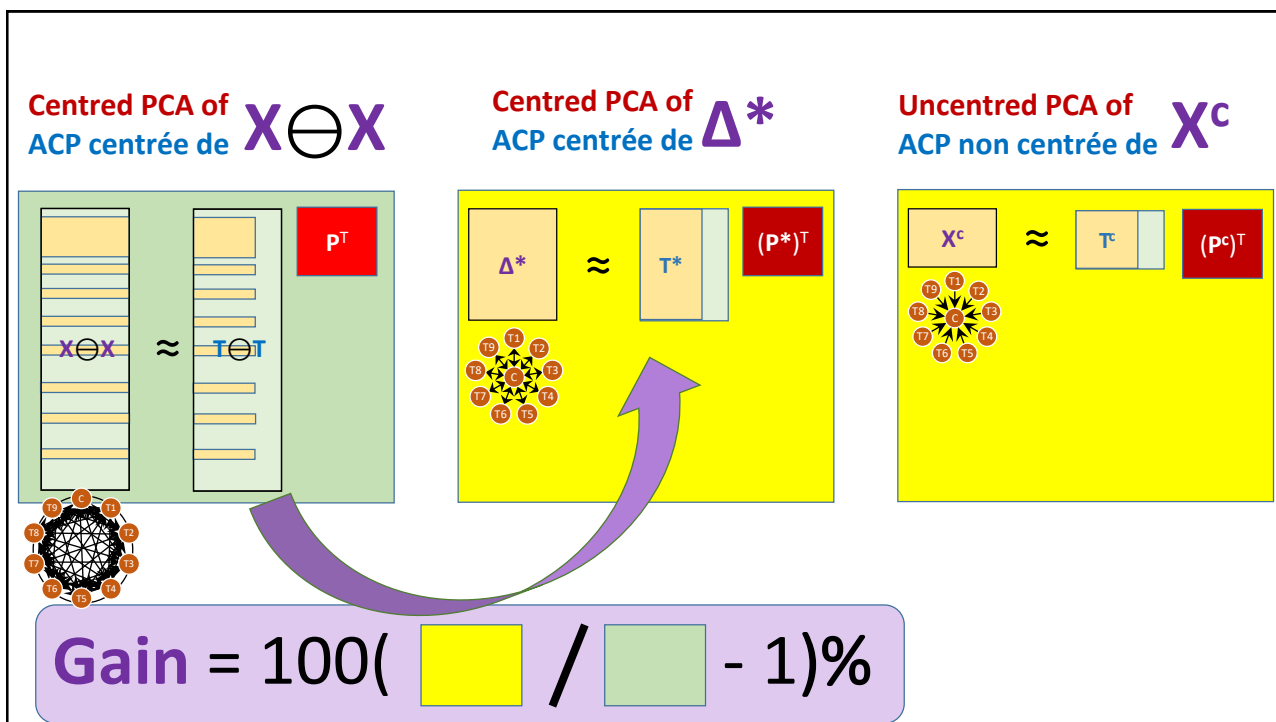
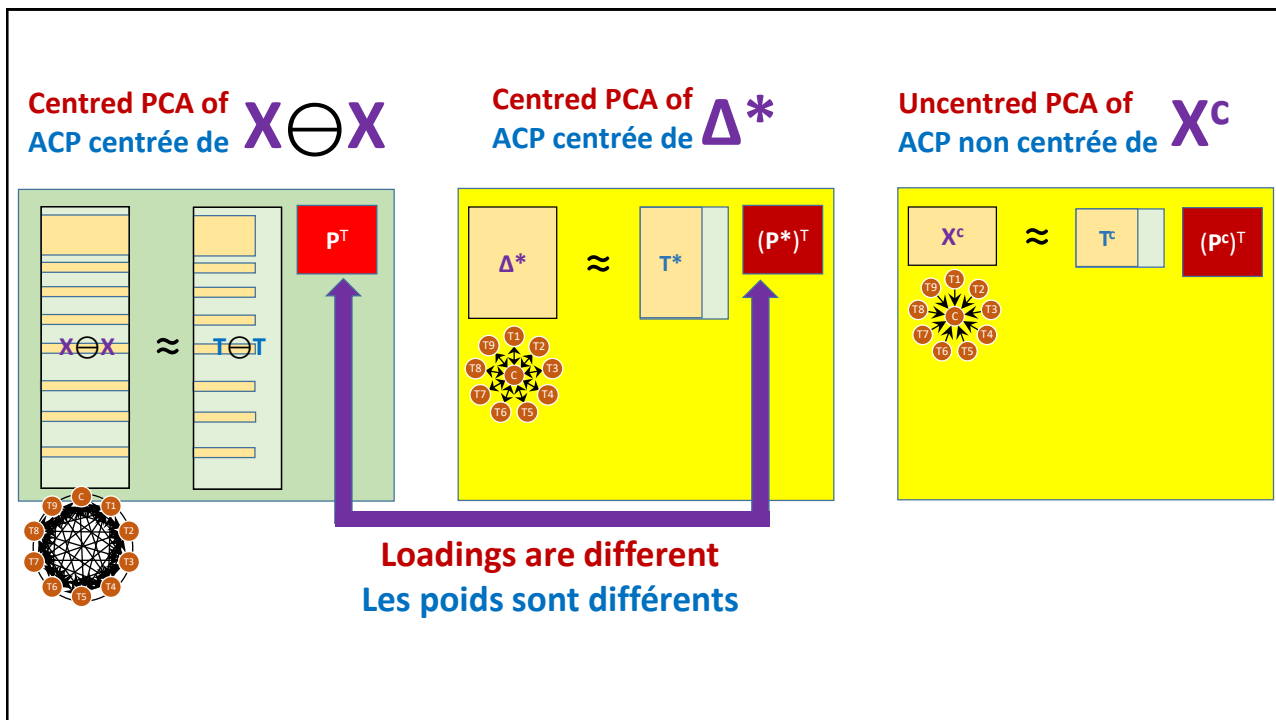


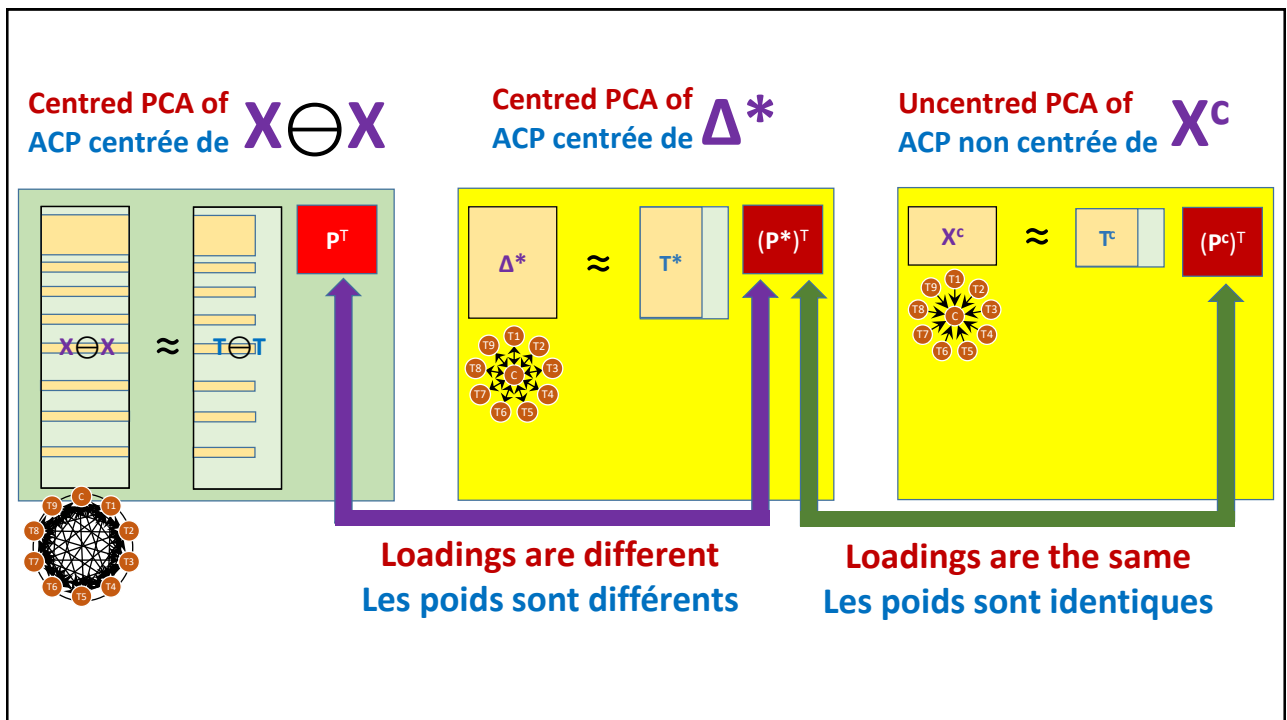
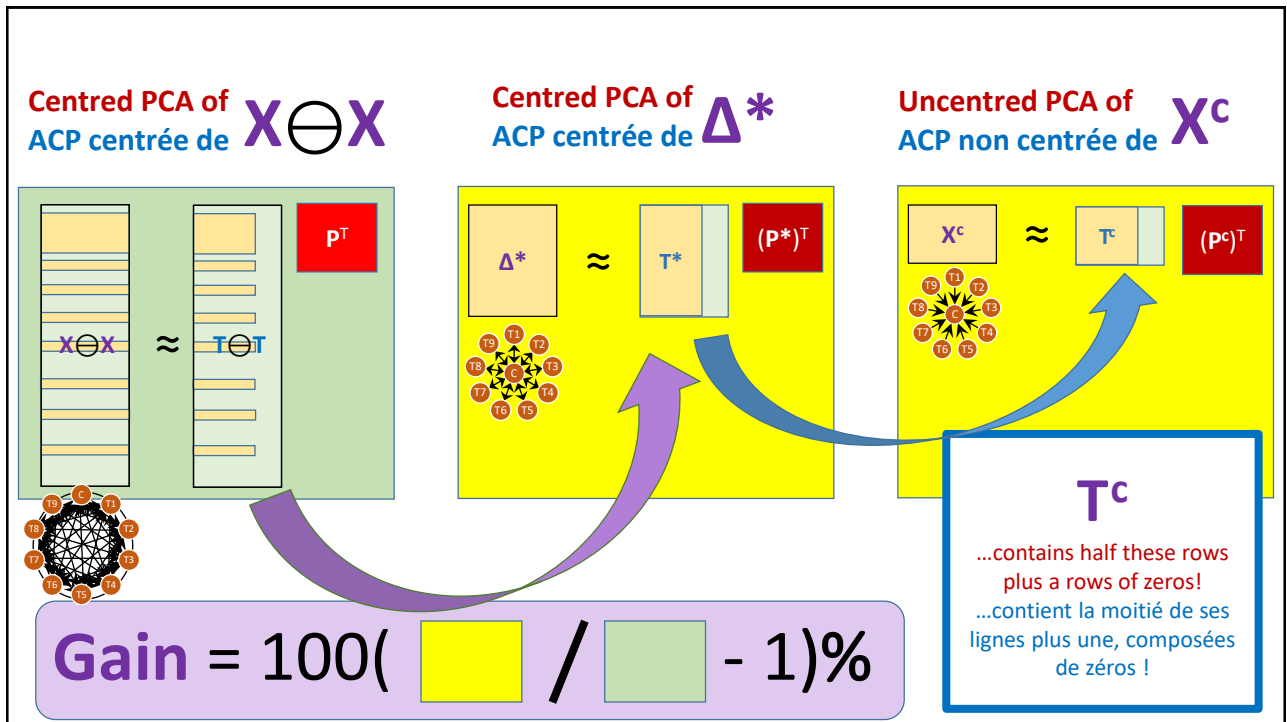
Centred PCA of ACP centrée de Δ^*

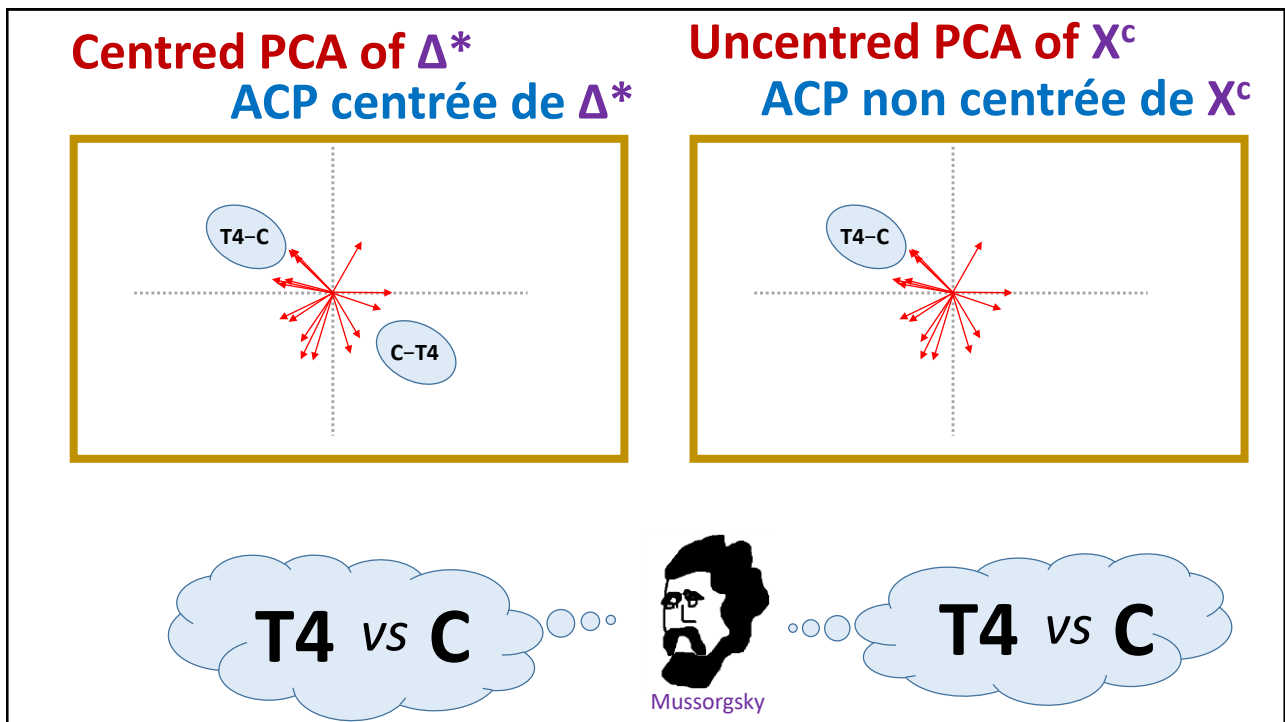
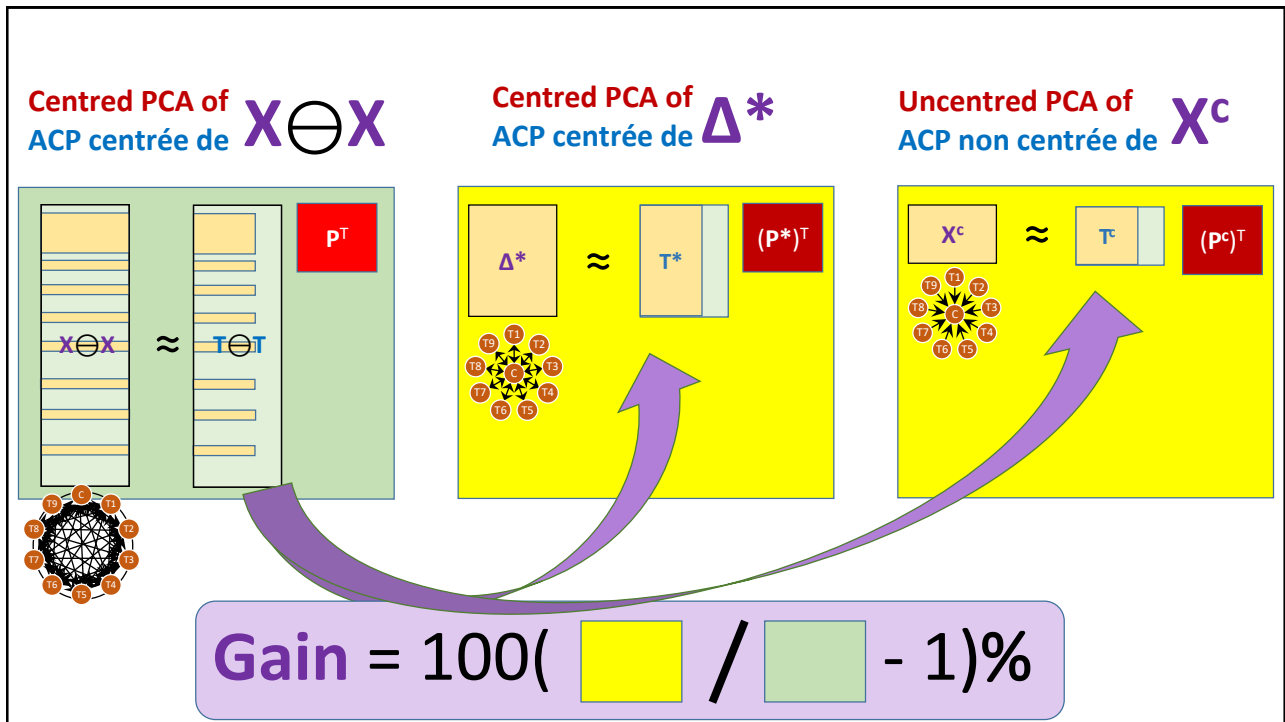


Uncentred PCA of ACP non centrée de X^C

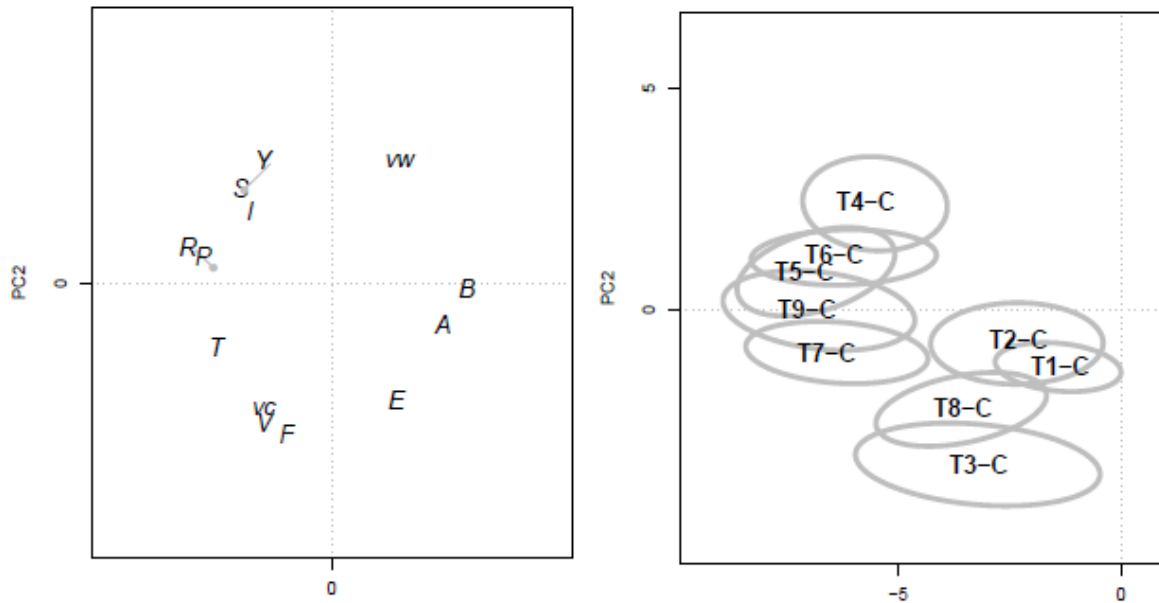




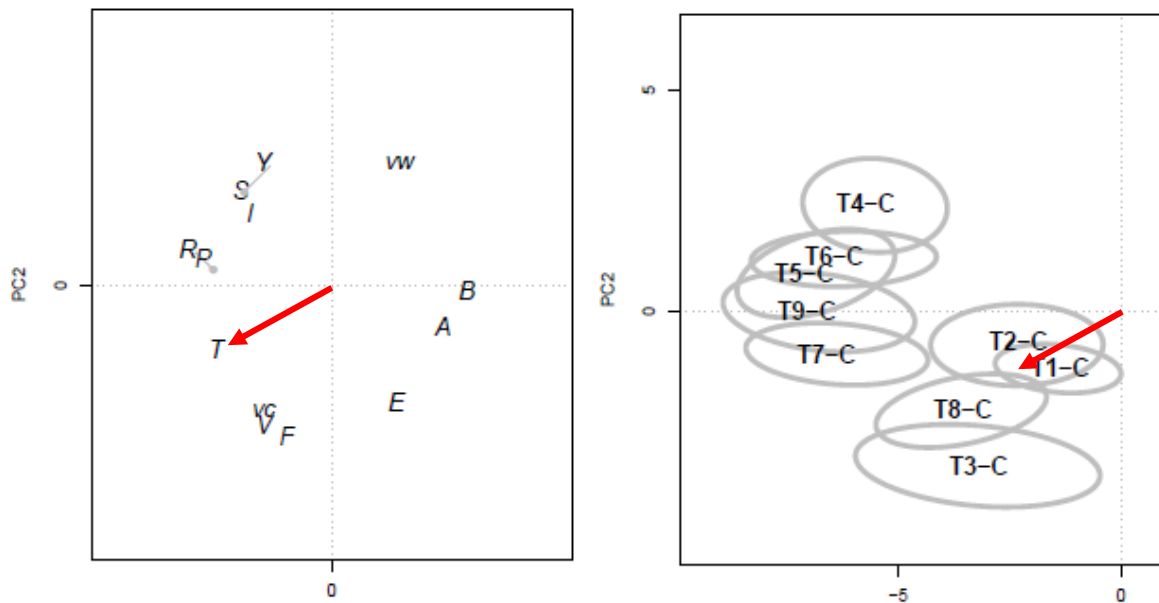




Uncentred PCA of X^c ACP non centrée de X^c



Uncentred PCA of X^c ACP non centrée de X^c



For investigating Test-Control paired comparisons...

Pour étudier les comparaisons par paires Test-Contrôle...

Advantages of uncentred PCA of X^c

- “best” subspace for investigating the relevant test-control pairs
- components ordered by importance
- these particular uncentred PCA results have a conventional “variance interpretation”
- origin interpretation: “no difference from control”

Avantages de l'ACP non centrée de X^c

- le « meilleur » sous-espace pour l'étude des paires test-contrôle pertinentes
- les composantes sont ordonnées selon leur importance
- ces résultats particuliers de l'ACP non centrée ont l'interprétation conventionnelle de l'inertie
- interprétation de l'origine : « pas de différence avec le contrôle »



John Castura



Véronique Cariou



Tormod Næs



For further information, please contact

Pour plus d'informations, veuillez contacter

jcastura@compusense.com

Discussion

Download a preprint
manuscript for this talk with
this QR code

Télécharger le manuscrit de
cette conférence avec ce
code QR

<https://doi.org/10.5281/zenodo.15073361>

