

ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (PCA)

ALAN REYES-FIGUEROA

INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA DE DATOS

(AULA 10) 07.FEBRERO.2022

1. Métodos exploratorios y de visualización (30%)

Métodos exploratorios para datos multivariados: Visualización y resumen de la dependencia entre variables. Métodos de proyección: Descomposición SVD. Componentes principales (PCA). Re-escalamiento multidimensional. Componentes independientes (ICA). Reducción de la dimensionalidad: Factoración de matrices no-negativas (NNMF). Variables latentes. Otros tópicos.

2. Aprendizaje no-supervisado (20%)

Métodos de agrupamiento. k -medias, k -medianas, k -medoides. Métodos de agrupamiento jerárquico: dendrogramas. Agrupamiento espectral. El método EM.

3. Aprendizaje supervisado (50%)

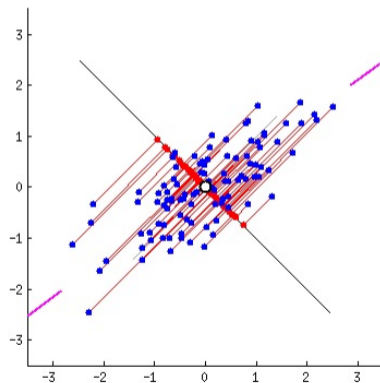
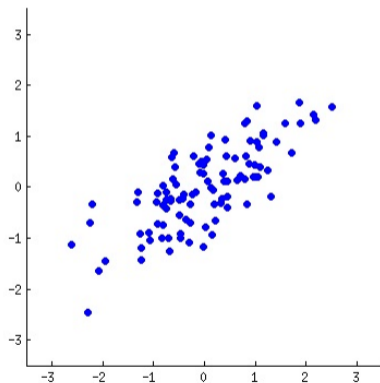
El clasificador bayesiano. Análisis discriminante. k -nearest neighbors. Regresión logística. Máquinas de soporte vectorial (SVM). Métodos kernel. Árboles de Decisión y random forests. Bagging y Boosting. Redes neuronales artificiales. Validación cruzada y selección de modelos.

Mínimos cuadrados. Modelos de regresión lineal (generalizada). Selección de variables. Métodos de regularización: Ridge (L_2), LASSO (L_1), Elastic-net (L_0). Criterios de selección de modelos: Mínimos cuadrados parciales. Métodos basados en mezclas. Funciones de base radial (RBFs). mezclas Gaussianas (GMM). Estimaciones empíricas de distribuciones.

Componentes principales

Objetivo: encontrar una estructura subyacente en los datos.

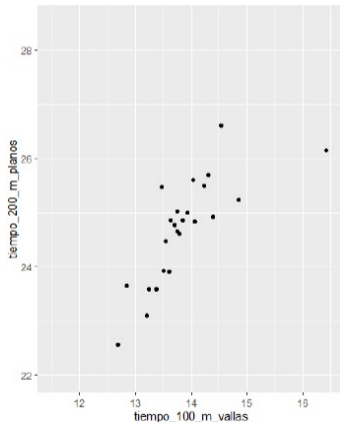
- Proyectar a un subespacio adecuado.



Componentes principales

Ejemplo: Atletismo, pruebas de 100m y 200m.

100m vallas	200m planos
12.69	22.56
12.85	23.65
13.2	23.1
13.61	23.92
13.51	23.93
13.75	24.65
13.38	23.59
13.55	24.48
13.63	24.86
13.25	23.59
13.75	25.03
13.24	23.59
13.85	24.87
13.71	24.78
13.79	24.61
13.93	25
13.47	25.47
14.07	24.83
14.39	24.92
14.04	25.61
14.31	25.69
14.23	25.5
14.85	25.23
14.53	26.61
16.42	26.16

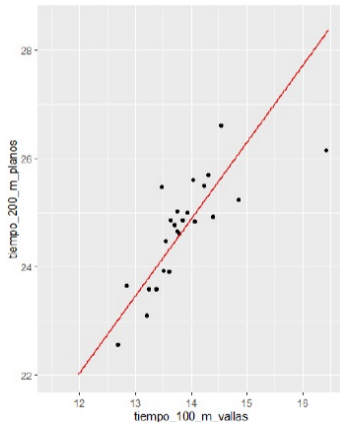


Se observa cierta estructura.

Componentes principales

Ejemplo: Atletismo, pruebas de 100m y 200m.

100m vallas	200m planos
12.69	22.56
12.85	23.65
13.2	23.1
13.61	23.92
13.51	23.93
13.75	24.65
13.38	23.59
13.55	24.48
13.63	24.86
13.25	23.59
13.75	25.03
13.24	23.59
13.85	24.87
13.71	24.78
13.79	24.61
13.93	25
13.47	25.47
14.07	24.83
14.39	24.92
14.04	25.61
14.31	25.69
14.23	25.5
14.85	25.23
14.53	26.61
16.42	26.16



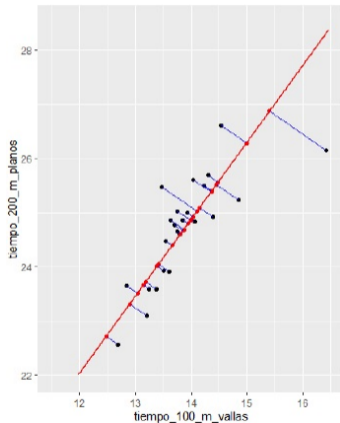
Se observa cierta estructura.

Karl Pearson (1901),
describir con una recta.

Componentes principales

Ejemplo: Atletismo, pruebas de 100m y 200m.

100m vallas	200m planos
12.69	22.56
12.85	23.65
13.2	23.1
13.61	23.92
13.51	23.93
13.75	24.65
13.38	23.59
13.55	24.48
13.63	24.86
13.25	23.59
13.75	25.03
13.24	23.59
13.85	24.87
13.71	24.78
13.79	24.61
13.93	25
13.47	25.47
14.07	24.83
14.39	24.92
14.04	25.61
14.31	25.69
14.23	25.5
14.85	25.23
14.53	26.61
16.42	26.16



Se observa cierta estructura.

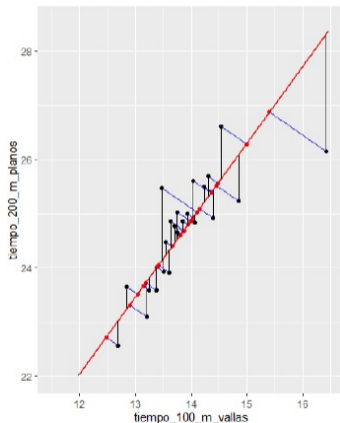
Karl Pearson (1901), describir con una recta.

Hotelling (1933), relación entre variables $g(X_1, X_2)$.

Componentes principales

Ejemplo: Atletismo, pruebas de 100m y 200m.

100m vallas	200m planos
12.69	22.56
12.85	23.65
13.2	23.1
13.61	23.92
13.51	23.93
13.75	24.65
13.38	23.59
13.55	24.48
13.63	24.86
13.25	23.59
13.75	25.03
13.24	23.59
13.85	24.87
13.71	24.78
13.79	24.61
13.93	25
13.47	25.47
14.07	24.83
14.39	24.92
14.04	25.61
14.31	25.69
14.23	25.5
14.85	25.23
14.53	26.61
16.42	26.16



Se observa cierta estructura.

Karl Pearson (1901), describir con una recta.

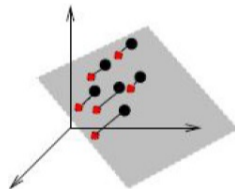
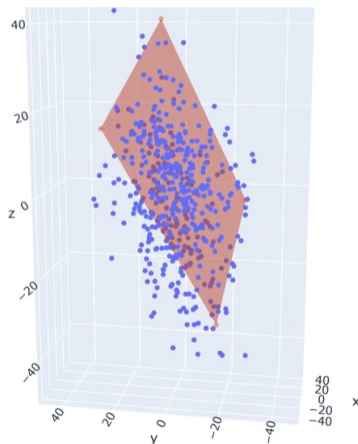
Hotelling (1933), relación entre variables $g(X_1, X_2)$.

No confundir con regresión,
Incorporar incertidumbre.

Componentes principales

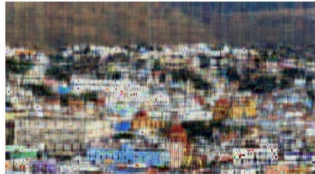
Ejemplo: Atletismo, pruebas de 100m, 200m y salto de longitud.

100m vallas	200m planos	salto long
12.69	22.56	7.27
12.85	23.65	6.71
13.2	23.1	6.68
13.61	23.92	6.25
13.51	23.93	6.32
13.75	24.65	6.33
13.38	23.59	6.37
13.55	24.48	6.47
13.63	24.86	6.11
13.25	23.59	6.28
13.75	25.03	6.34
13.24	23.59	6.37
13.85	24.87	6.05
13.71	24.78	6.12
13.79	24.61	6.08
13.93	25	6.4
13.47	25.47	6.34
14.07	24.83	6.13
14.39	24.92	6.1
14.04	25.61	5.99
14.31	25.69	5.75
14.23	25.5	5.5
14.85	25.23	5.47
14.53	26.61	5.5
16.42	26.16	4.88

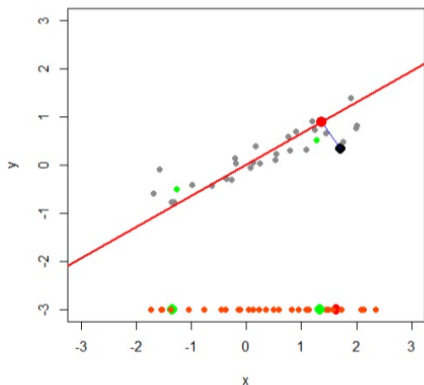


Componentes principales

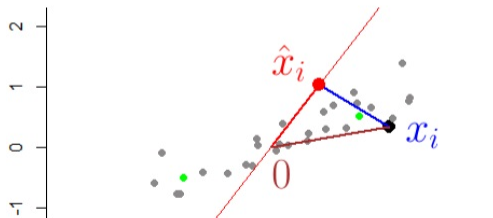
Ejemplo: Compresión de imágenes digitales.



Componentes principales



- Buscamos direcciones informativas (estructura)
informativo = máxima variabilidad
- Buscamos minimizar el error de reconstrucción.



Componentes principales

Obs! Los dos enfoques anteriores son equivalentes.

Prueba:

Denotemos X la v.a. que corresponde a los datos ($X \in \mathbb{R}^2$ en el ejemplo). Por simplicidad, supongamos que los datos \mathbf{x}_i están centrados (i.e. $\mathbb{E}(X) = \mathbf{o}$).

$$\begin{aligned} MSS &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i\|^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|(\mathbf{x}_i - \hat{\mathbf{x}}_i) + \hat{\mathbf{x}}_i\|^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{x}_i - \hat{\mathbf{x}}_i\|^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\hat{\mathbf{x}}_i\|^2 = \text{Reconstruction error} + \text{Var}(X). \end{aligned}$$

MSS es fija, luego minimizar el error de reconstrucción equivale a maximizar la varianza de los datos.

Componentes principales

Enfoque probabilístico:

Matriz de datos

$$\mathbb{X} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1d} \\ X_{21} & X_{22} & \dots & X_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \dots & X_{nd} \end{pmatrix}.$$

- Consideramos $X = (X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^d$ como variable aleatoria, y los datos $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{id}) \in \mathbb{R}^d$, para $i = 1, 2, \dots, n$ como muestra de X .
- Supondremos que conocemos la ley \mathbb{P}_X .
- Supondremos también que $\mathbb{E}(X) = \mathbf{0}$ (los datos están centrados). En consecuencia, $\text{Var}(X) = \mathbb{X}^T \mathbb{X}$.

Componentes principales

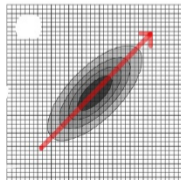
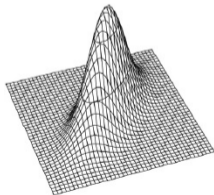
Caso particular 1D: (proyectamos a un subespacio 1-dimensional).

Suponga que proyectamos a un subespacio $\langle l \rangle \Rightarrow \langle l, X \rangle = l^T X$.

Buscamos maximizar

$$\max_{\|l\|=1} \text{Var}(l^T X) = \max_{l \neq 0} \frac{\text{Var}(l^T X)}{l^T l} = \max_{l \neq 0} \frac{l^T \text{Var}(X) l}{l^T l} = \max_{l \neq 0} \frac{l^T (\mathbb{X}^T \mathbb{X}) l}{l^T l}.$$

(cociente de Rayleigh).



Componentes principales

Teorema (Teorema espectral / Descomposición espectral)

Sea $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ una matriz simétrica (operador auto-adjunto). Entonces, A admite una descomposición de la forma

$$A = U\Lambda U^T,$$

donde $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d)$ es la matriz diagonal formada por los autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_d$ de A , y

$$U = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \dots & \mathbf{q}_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

es una matriz ortogonal cuyas columnas son los autovalores de A , con \mathbf{q}_i el autovalor correspondiente a λ_i , $i = 1, 2, \dots, d$.

Componentes principales

Teorema (Teorema espectral / Descomposición espectral)

En otras palabras, A puede escribirse como una suma de matrices de rango 1

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \dots & \mathbf{q}_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \lambda_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_2^T \\ \dots \\ \mathbf{q}_d^T \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^d \lambda_i \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T. \end{aligned}$$

Componentes principales

Comentario:

Para $1 \leq k \leq d$, la suma

$$\hat{A}_k = \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T,$$

es una matriz de rango k siempre que los $\lambda_i \neq 0$ (ya que los \mathbf{q}_i son independientes).

Veremos más adelante, que esta es la mejor aproximación de rango k de la matriz A .