UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Informàtica etsinf

Tema 3. Reducción de dimensionalidad

Percepción (PER)

Curso 2021/2022

Departamento de Sistemas Informáticos y Computación

Índice

Índice

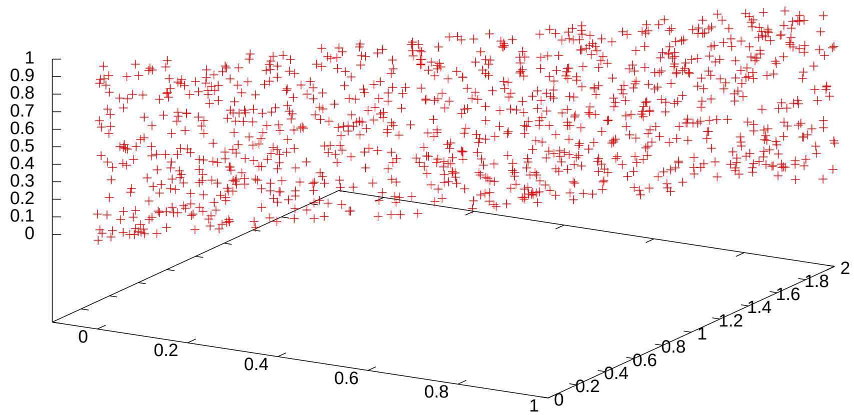
Introducción

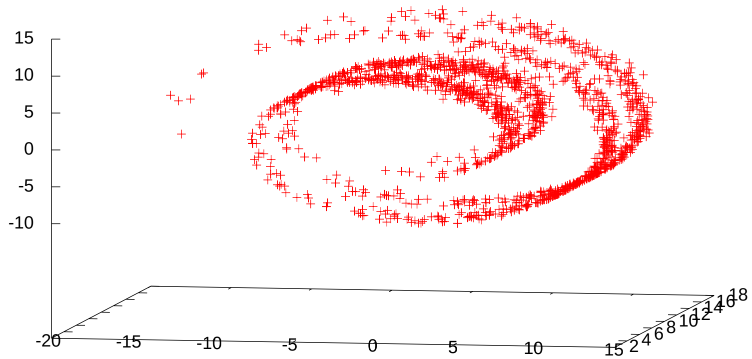
- La representación vectorial de un objeto $\mathbf{x}$ puede ser de muy alta dimensionalidad $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$ siendo $D > 1000$
- En un espacio de alta dimensionalidad las técnicas de aprendizaje se ven afectadas por lo que se conoce como la *maldición de la dimensionalidad*[1]
- Razones para aplicar técnicas de reducción de dimensionalidad:
  - La dimensionalidad intrínseca puede ser menor que la de la representación
  - Las componentes de cada vector pueden presentar fuertes correlaciones
  - Reducción de parámetros del clasificador, mejorando su estimación
  - Por eficiencia de tiempo de cómputo y ocupación en memoria
  - Eliminación del ruido durante la adquisición de datos

[1] En inglés, *curse of dimensionality*.

Dimensionalidad intrínseca de los datos

El espacio de representación puede ser $\mathbb{R}^D$ pero los objetos tienen una representación intrínseca $\mathbb{R}^{D'}$ con $D' < D$





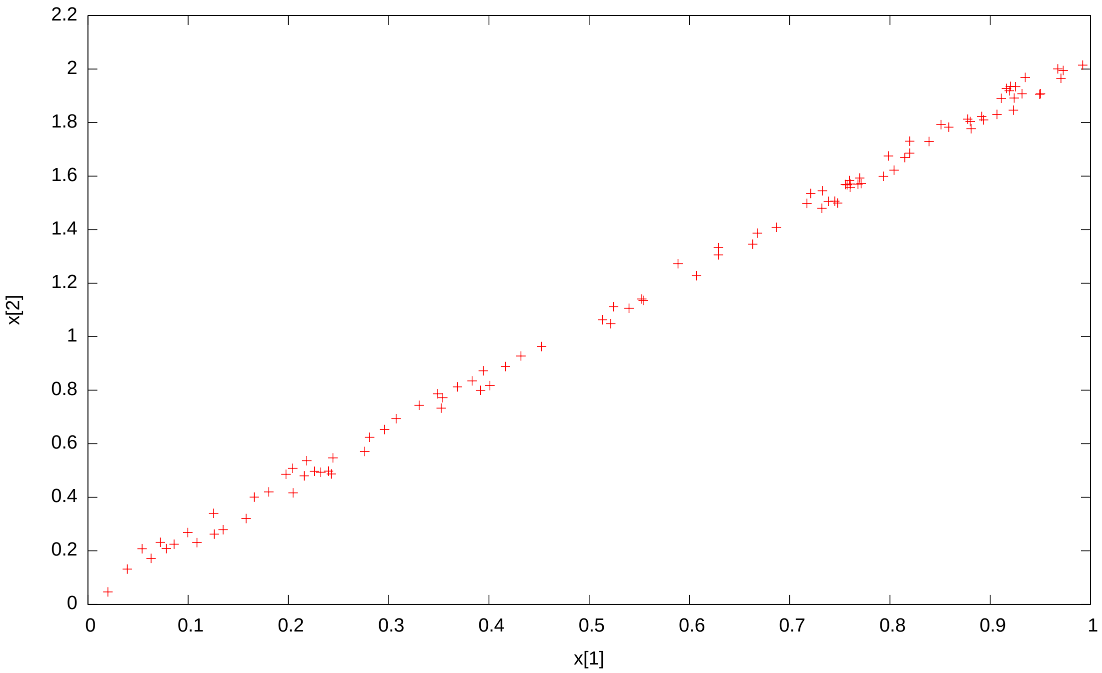
En ambos ejemplos $D = 3$ y $D' = 2$

Correlaciones entre componentes

Algunas dimensiones están correladas y no aportan información extra

Ejemplo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$:

- $x_2 = 2\,x_1 \rightarrow$ Dimensionalidad intrínseca $D' = 1$
- $x_2 = 2\,x_1 + \epsilon$ con ϵ independiente de $x_1 \rightarrow D' = 2$
  pero x_2 no aporta mucha más información que x_1



Estimación de los parámetros del clasificador

- Sea un clasificador por funciones discriminantes lineales (FDLs)
- $G \equiv \{g_1, g_2, \dots g_C\}$, $g_c(\mathbf{x}) = \mathbf{w}_c \cdot \mathbf{x} + b$
- Si $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$, hay $C \times (D+1)$ parámetros a estimar
- Ejemplo:

  Clasificar mediante FDLs las caras de 100 individuos. De cada individuo se tienen 4 imágenes. Cada imagen consta de 75×75 píxeles. Considerando una representación geométrica global tenemos que:

  $100 \times (5625 + 1) = 562600$ parámetros a estimar con sólo 400 muestras

- Problema:

  Un espacio de 75×75 dimensiones se puede considerar *vacío* con sólo 400 ejemplos. Es más, para que dejara de considerarse *vacío* haría falta un número de muestras que nunca vamos a tener disponibles

Reducción de dimensionalidad

- Proceso para reducir la dimensionalidad del espacio de representación de los datos

- Siendo $E = \mathbb{R}^D$ el espacio de representación de los datos, la reducción de dimensionalidad se puede ver como una función:

$$f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^k, \quad k \ll D$$

- Así, dada una representación $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$, tendremos $\mathbf{x}' = f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^k$

Índice

Proyecciones lineales

- Sólo consideraremos proyecciones lineales
- Son el resultado de multiplicar $\mathbf{x}$ por una *matriz de proyección* W

$$\underset{k \times 1}{\mathbf{x}'} = \underset{k \times D}{W^t} \cdot \underset{D \times 1}{\mathbf{x}}$$

donde $W \in \mathbb{R}^{D \times k}$ y $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$, $k < D$

- La proyección resulta en un vector $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^k$
- Ejemplo para $D = 3$ y $k = 2$

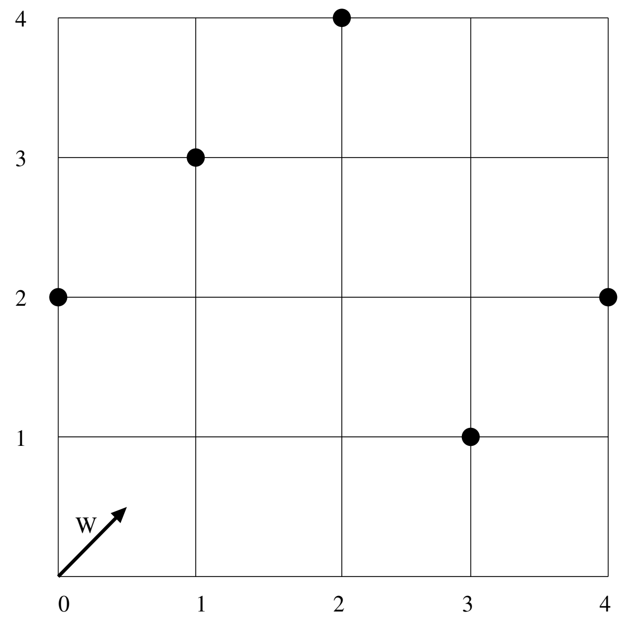
$$\underset{\mathbf{x}'}{\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}} = \underset{W^t}{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}} \cdot \underset{\mathbf{x}}{\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}$$

Proyecciones lineales

- Sean los siguientes puntos en un espacio $\mathbb{R}^2$:

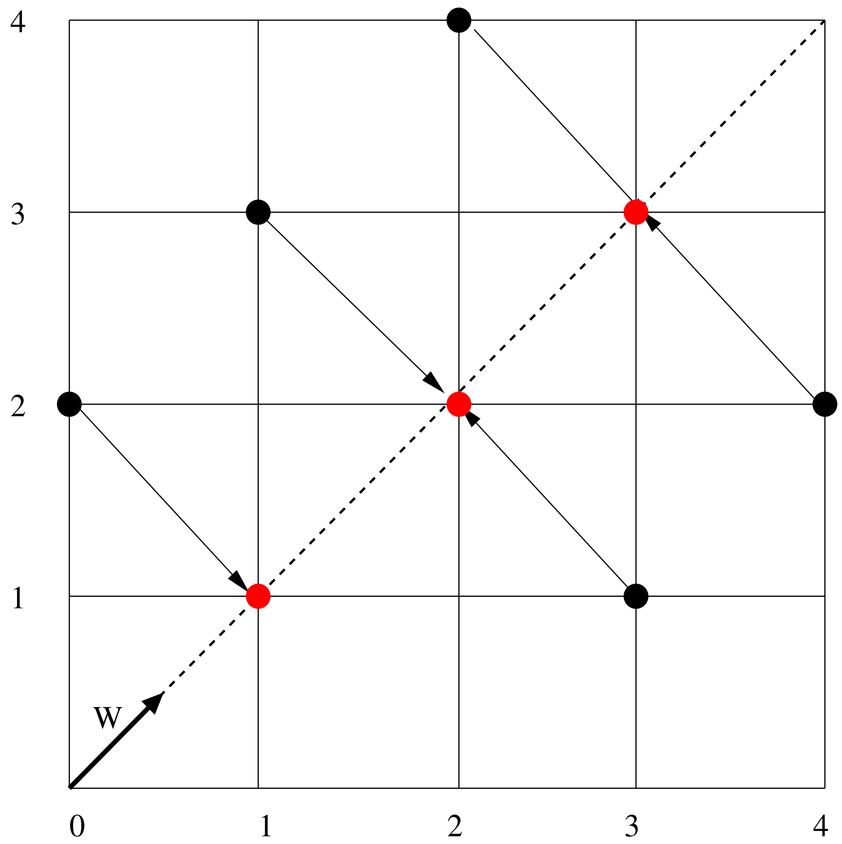
$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_4 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_5 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$$

- Calculemos la proyección con $W = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$



Proyecciones lineales

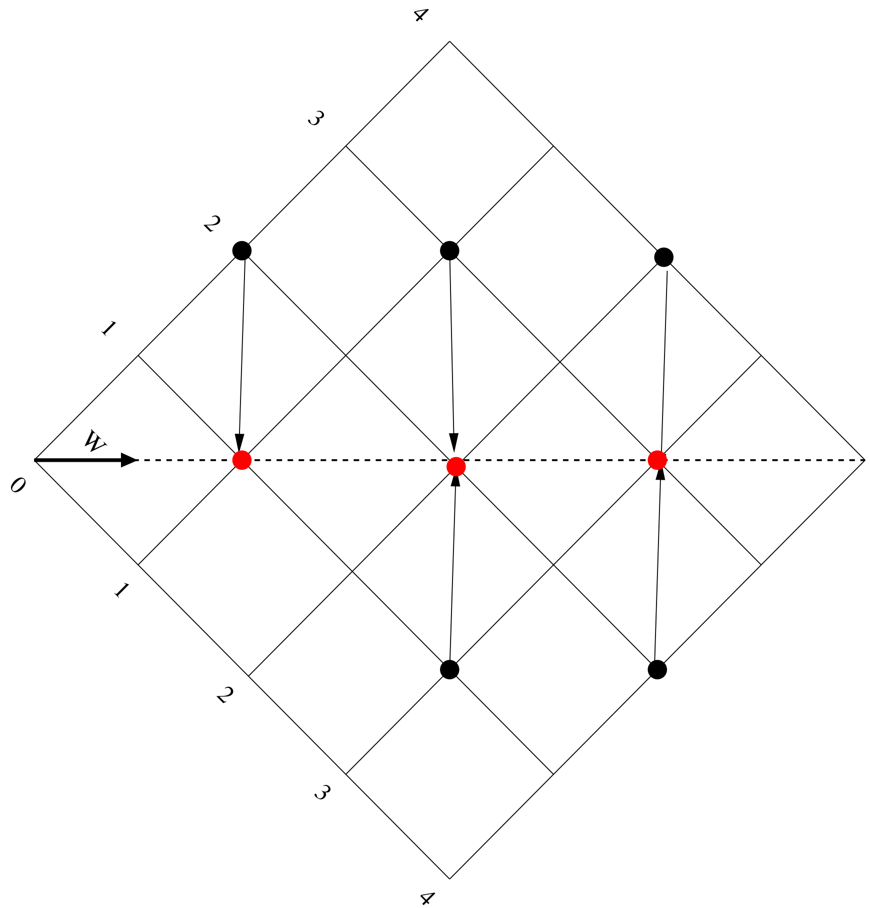
¿Qué está pasando con $\mathbf{x}_2$ y $\mathbf{x}_4$?



Proyección ortogonal a W

Proyecciones lineales

Desde el punto de vista de W, esta reducción de dimensionalidad es una proyección sobre la recta definida por dicha matriz $W = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$



Obsérvese que:

- W es de módulo unitario
- $\sqrt{2}$ es la diagonal del cuadrado (factor de normalización)
- Las proyecciones son múltiplos del factor de normalización de W ($\sqrt{2}$)

Proyecciones lineales: interpretación geométrica

- Una proyección es un producto escalar de los vectores columna $\mathbf{w}$ de W por $\mathbf{x}$

$$\mathbf{w}^t \cdot \mathbf{x} = |\mathbf{w}| \cdot |\mathbf{x}| \cdot \cos\alpha$$

donde α es el ángulo definido entre $\mathbf{w}$ y $\mathbf{x}$

- Calculemos ahora la proyección con $W = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ de:

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}_5 = \begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

- ¿Cómo podríamos interpretar el signo y magnitud del resultado?

Proyecciones lineales: interpretación geométrica

- En toda proyección lineal la dimensión i-ésima de $\mathbf{x}'$ se calcula como:

$$\mathbf{x}'_i = \mathbf{w}_i^t \cdot \mathbf{x}$$

donde $\mathbf{w}_i$ es la columna i-ésima de W

- En la práctica, $\mathbf{x}$ se multiplica por cada uno de los vectores columna de W
- El producto escalar $\mathbf{w}_i^t \cdot \mathbf{x}$ normalizado es la similitud coseno entre $\mathbf{w}_i$ y $\mathbf{x}$:

$$\cos\alpha = \frac{\mathbf{w}_i^t \cdot x}{|\mathbf{w}_i| \cdot |x|}$$

Proyecciones lineales y reducción de dimensionalidad

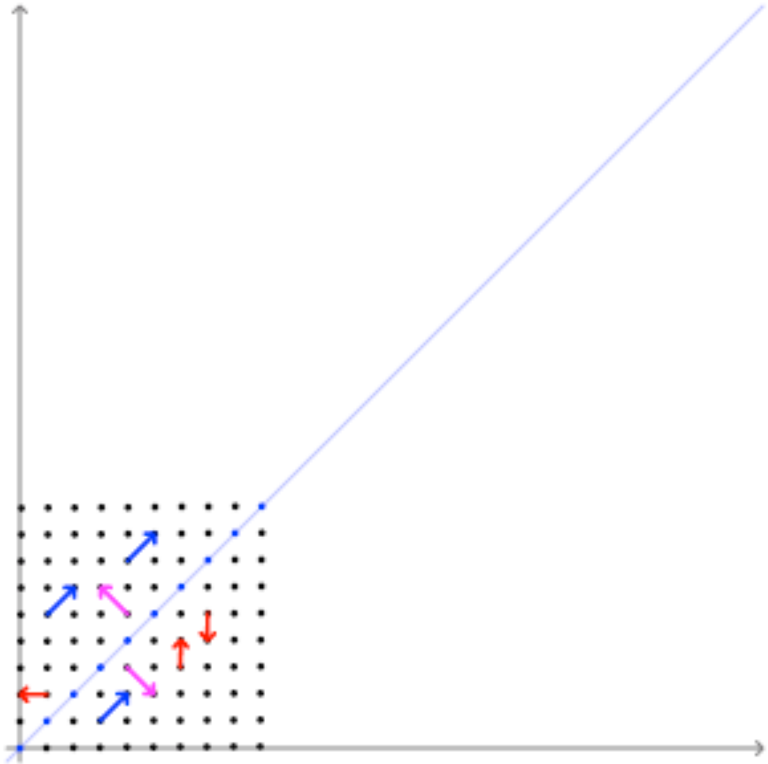
- En las reducciones de dimensionalidad lineales se busca una W *adecuada*
- La nueva representación en $E' \equiv \mathbb{R}^k$ debería cumplir las propiedades de:
  - *Continuidad*: cosas cercanas permanecen cercanas
  - *Discriminativa*: datos de distintas clases están separados
  - *Invarianza*: a transformaciones usuales en el espacio original
- Una proyección lineal con estas propiedades es en general difícil de hallar
- Propuesta:
  - Búsqueda de la W adecuada como un problema de optimización
  - Selección de criterio de optimización según una cierta propiedad deseable
- Este problema de optimización requiere el uso de ***vectores y valores propios*** (*eigenvectors* y *eigenvalues*, respectivamente)

Índice

Vectores propios de una matriz

Transformación lineal: cambios lineales en el propio espacio, dados por una matriz cuadrada A

Ejemplo de transformación lineal ($\mathbf{x}' = A^t\mathbf{x}$ donde $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$, $\mathbf{x}', \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$):



Vectores:

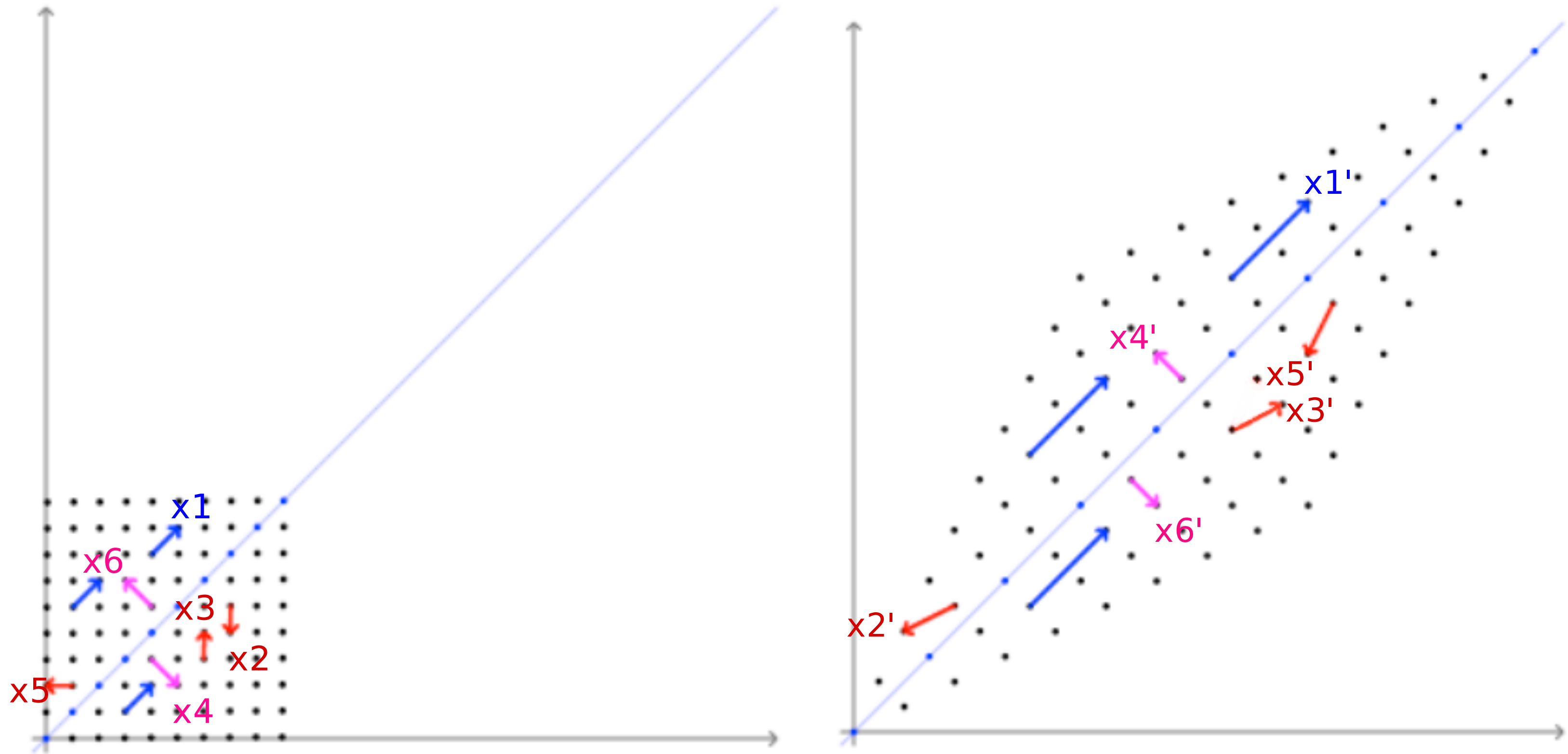
$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \nearrow \qquad \mathbf{x}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \searrow$$

$$\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \downarrow \qquad \mathbf{x}_5 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow$$

$$\mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \uparrow \qquad \mathbf{x}_6 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \nwarrow$$

Vectores propios de una matriz

Si aplicamos la transformación lineal con $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ tenemos:



¿Qué vectores no son modificados en dirección, aunque puede que en magnitud?

Vectores propios de una matriz

- Observamos que los vectores

$$\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

  son simplemente escalados pero no rotados

- Dichos vectores son ***vectores propios*** (*eigenvectors*) de la matriz A
- Se dice que $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ es un vector propio de A si:

$$A^t\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

  con $\lambda \in \mathbb{R}$

- A este escalar se le conoce como ***valor propio*** (*eigenvalue*)

Vectores propios de una matriz. Problema

- Muchas técnicas usan el cálculo de vectores y valores propios de una matriz
- Los valores propios se interpretan según qué represente esa matriz
- Encontrar los vectores propios supone resolver el sistema:

$$A^t\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

o lo que es lo mismo

$$A^t\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = 0 \quad \longrightarrow \quad (A^t - \lambda I)\mathbf{x} = 0$$

- Por simplicidad en la presentación del cálculo de vectores y valores propios utilizaremos la notación A sin transponer

$$A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = 0 \quad \longrightarrow \quad (A - \lambda I)\mathbf{x} = 0$$

Vectores propios de una matriz. Solución

- Según un teorema fundamental del álgebra lineal:

$$(A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad \leftrightarrow \quad \det(A - \lambda I) = 0$$

- Pasos de resolución:
  1. Calcular valores propios λ (los que hacen que $\det(A - \lambda I) = 0$)
  2. Utilizar λ para resolver el sistema lineal $(A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$
- Por lo tanto cada valor propio tiene asociado un vector propio:

$$(A - \lambda_1 I)\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$$
$$\cdots$$
$$(A - \lambda_n I)\mathbf{x}_n = \mathbf{0}$$

- El valor $\mathbf{0}$ denota un vector D-dimensional de ceros
- $n = D$ si la matriz $A \in \mathbb{R}^{D \times D}$ es de rango completo

Vectores propios de una matriz. Ejemplo

Sea $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ vamos a calcular sus valores y vectores propios

$$\det(A - \lambda I) = 0 \rightarrow \det\left(\begin{pmatrix} 1-\lambda & 2 \\ 2 & 1-\lambda \end{pmatrix}\right) = 0 \rightarrow (1-\lambda)^2 - 4 = 0 \rightarrow \boxed{\lambda = \{-1{,}3\}}$$

Para $\lambda_1 = -1$, encontrar $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{0}$ que cumpla $(A - \lambda_1 I)\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{matrix} (2x_{11} + 2x_{12}) = 0 \\ (2x_{11} + 2x_{12}) = 0 \end{matrix} \quad \rightarrow \quad \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Para $\lambda_2 = 3$, encontrar $\mathbf{x}_2 \neq \mathbf{0}$ que cumpla $(A - \lambda_2 I)\mathbf{x}_2 = \mathbf{0}$

$$\begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{21} \\ x_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \begin{matrix} (-2x_{21} + 2x_{22}) = 0 \\ (2x_{21} - 2x_{22}) = 0 \end{matrix} \quad \rightarrow \quad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

En realidad $\mathbf{x}_1$ y $\mathbf{x}_2$ definen una *base*, ya que existen infinitos vectores propios.

Consideraciones prácticas

En general, no existe solución cerrada para polinomios de orden > 4 (Teorema de Abel-Ruffini)

Existen algoritmos numéricos iterativos para encontrar soluciones:

- QR
- Householder
- Lanczos

Índice

PCA: Principal Component Analysis

- PCA es probablemente la técnica de reducción de dimensionalidad más conocida

- Es una técnica de reducción de dimensionalidad *no supervisada* (la capacidad discriminativa entre clases no se tiene en cuenta)

- Es muy empleada por preservar la mayor parte de la *varianza* de los datos, que se asume que incluye la capacidad de discriminar entre clases

- Se suele emplear como un preproceso previo a otras técnicas de reducción de dimensionalidad supervisadas

Problema de optimización

- Objetivo PCA: encontrar una matriz de proyección W que minimice el error de reconstrucción
- Sea un conjunto de datos $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N\}$ con $\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D$ y $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$
- Dado un vector $\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D$, el proceso de reconstrucción es:
  - Se resta $\overline{\mathbf{x}}$ a $\mathbf{x}_n$ y se proyecta el resultado al espacio reducido $\mathbb{R}^k$

$$\mathbf{x}'_n = W^t(\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}) \qquad W \in \mathbb{R}^{D\times k} \quad \text{y} \quad \mathbf{x}'_n \in \mathbb{R}^k$$

  - Se proyecta $\mathbf{x}'_n$ al espacio original $\mathbb{R}^D$ y se suma $\overline{\mathbf{x}}$

$$\hat{\mathbf{x}}_n = \overline{\mathbf{x}} + V^t\mathbf{x}'_n \quad V \in \mathbb{R}^{k\times D} \quad \text{y} \quad \hat{\mathbf{x}}_n \in \mathbb{R}^D$$

- El error de reconstrucción del conjunto de datos al proyectar a $\mathbb{R}^k$ es:

$$\mathrm{error}_k = \sum_{n=1}^{N} \|\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n\|^2 = \sum_{n=1}^{N}\sum_{d=1}^{D}(\mathbf{x}_{nd} - \hat{\mathbf{x}}_{nd})^2 = \sum_{n=1}^{N}(\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n)^t(\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n)$$

Problema de optimización

- W está formada por k vectores *columna* $\mathbf{w}_j \in \mathbb{R}^{D \times 1}$
- W define una base ortonormal donde $W^t W = I$:

$$\mathbf{w}_j^t \mathbf{w}_j = 1$$
$$\mathbf{w}_j^t \mathbf{w}_i = 0 \quad \text{si} \quad i \neq j$$

- Con estas condiciones $V = W^t$ minimiza el error de reconstrucción, es decir:

$$\hat{\mathbf{x}}_n = \overline{\mathbf{x}} + W W^t (\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}) \quad \text{con} \quad W \in \mathbb{R}^{D \times k}$$

- Objetivo: encontrar matriz de proyección W que minimice error de reconstrucción

$$\widehat{W} = \underset{W}{\text{argmin}} \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n)^t (\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n)$$

Problema de optimización

- Operando convenientemente, equivale a:

$$
\begin{aligned}
\widehat{W} &= \underset{W}{\text{argmin}} \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n)^t (\mathbf{x}_n - \hat{\mathbf{x}}_n) \\
&= \underset{W}{\text{argmin}} \sum_{j=k+1}^{D} \mathbf{w}_j^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w}_j \\
&= \underset{W}{\text{argmax}} \sum_{j=1}^{k} \mathbf{w}_j^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w}_j
\end{aligned}
$$

donde $\Sigma_{\mathcal{X}}$ es la matriz de covarianza de los datos.

Detalles de los cálculos en documento en PoliformaT

Problema de optimización

- Por simplicidad, consideramos un único vector $\mathbf{w}$ que minimiza el error de reconstrucción cuando proyectamos a una única dimensión

$$\hat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^D}{\text{argmax}} \; \mathbf{w}^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w} \quad \text{sujeto a que} \quad \mathbf{w}^t\mathbf{w} = 1$$

- Maximización con restricciones, resolución por *multiplicadores de Lagrange*

$$\hat{\mathbf{w}} = \underset{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^D}{\text{argmax}} \; \underset{\lambda\in\mathbb{R}}{\text{máx}} \; \mathbf{w}^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w} + \lambda \left(1 - \mathbf{w}^t\mathbf{w}\right)$$

- Tras derivar respecto a $\mathbf{w}$ y λ, e igualar a cero, se tiene que

$$\Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w} = \lambda \mathbf{w}$$

- Es decir, $\mathbf{w}$ es un vector propio de la matriz de covarianza de los datos $\Sigma_{\mathcal{X}}$ y λ su valor propio asociado.

Detalles de los cálculos en documento en PoliformaT

Problema de optimización

- ¿Qué vectores propios se deben usar en la proyección para minimizar el error de reconstrucción?
- Para minimizar el error de reconstrucción al proyectar a una dimensión:

$$\hat{\mathbf{w}} = \operatorname*{argmax}_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^D} \max_{\lambda\in\mathbb{R}} \mathbf{w}^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w} + \lambda \left(1 - \mathbf{w}^t \mathbf{w}\right)$$

- Como $\Sigma_{\mathcal{X}}\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w}$ y $\mathbf{w}^t\mathbf{w} = 1$

$$\hat{\mathbf{w}} = \operatorname*{argmax}_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^D} \max_{\lambda\in\mathbb{R}} \mathbf{w}^t \lambda \mathbf{w} + \lambda \left(1 - \mathbf{w}^t \mathbf{w}\right) = \operatorname*{argmax}_{\mathbf{w}\in\mathbb{R}^D} \max_{\lambda\in\mathbb{R}} \lambda$$

- Por tanto, se minimiza el error de reconstrucción al proyectar a una única dimensión cuando se toma el vector propio $\mathbf{w}$ asociado al mayor valor propio

Problema de optimización

- Para obtener el segundo vector propio que minimiza el error de reconstrucción al proyectar a dos dimensiones, lo expresaríamos como:

$$\hat{\mathbf{w}}_2 = \underset{\mathbf{w}_2 \in \mathbb{R}^D}{\text{argmax}} \; \mathbf{w}_2^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w}_2 \quad \text{sujeto a que} \quad \mathbf{w}_2^t \mathbf{w}_2 = 1 \;\; \text{y} \;\; \mathbf{w}_1^t \mathbf{w}_2 = 0$$

  es decir, el segundo vector de proyección debe ser unitario y ortogonal a $\mathbf{w}_1$

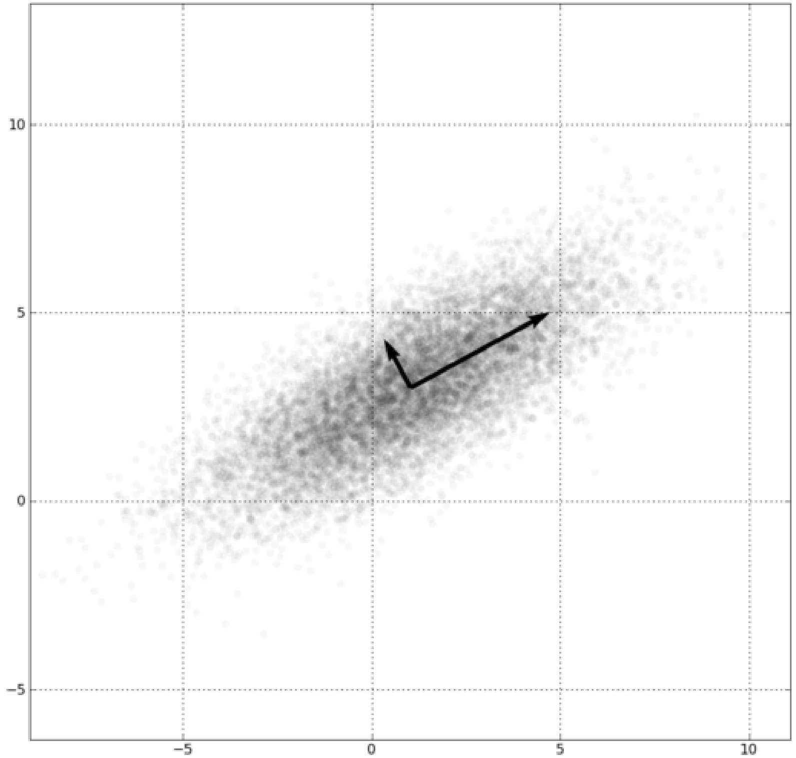
- Proceso iterativo de cálculo de vectores de proyección que se resume en:
  - Cada vector propio $\mathbf{w}_j$ tienen un valor propio asociado λ_j
  - $\widehat{W}$ son los vectores propios de $\Sigma_{\mathcal{X}}$ de mayor a menor valor propio
  - $\Sigma_{\mathcal{X}}$ puede tener hasta D vectores propios (si es de rango completo)

- El error de reconstrucción cuando se proyecta a k dimensiones es:

$$\text{error}_k = \sum_{j=k+1}^{D} \mathbf{w}_j^t \Sigma_{\mathcal{X}} \mathbf{w}_j = \sum_{j=k+1}^{D} \mathbf{w}_j^t \lambda_j \mathbf{w}_j = \sum_{j=k+1}^{D} \lambda_j$$

Interpretación gráfica de PCA

La proyección PCA se hace en la dirección de los vectores propios de mayor a menor valor propio, es decir, en las direcciones del espacio de mayor a menor varianza



- El primer vector propio $\mathbf{w}_1$ indica la dirección del espacio donde hay mayor varianza (λ_1) en los datos
- El segundo vector propio $\mathbf{w}_2$ indica una dirección del espacio ortogonal a $\mathbf{w}_1$ donde reside la mayor cantidad de varianza restante (no capturada en λ_1)

Problema de optimización. Resumen

- Para ***minimizar el error de reconstrucción*** a k dimensiones se proyecta con $W = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1 & \dots & \mathbf{w}_k \end{pmatrix}$ que son los k vectores propios de $\Sigma_{\mathcal{X}}$ con ***mayor valor propio asociado***

- Dado $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^D$ para proyectarlo a k dimensiones

$$\begin{array}{ccccc} \mathbf{y}' & = & W^t & \cdot & (\mathbf{y} - \overline{\mathbf{x}}) \\ k \times 1 & & k \times D & & D \times 1 \end{array}$$

siendo $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$

Algoritmo PCA

- Entrada: N, D, k, $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_N\}$
- Salida: W, $\overline{\mathbf{x}}$
- Algoritmo:
  1. Calcular la media de los datos: $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$
  2. Restar a todos los datos la media: $\mathbf{x}_n \leftarrow \mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}}$
  3. Calcular la matriz de covarianza: $\Sigma_{\mathcal{X}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n(\mathbf{x}_n)^t$
  4. Encontrar todos los vectores propios de $\Sigma_{\mathcal{X}}$
  5. Ordenarlos descendentemente según los valores propios asociados
  6. Definir W como la matriz con los k primeros vectores propios
- Importante: para aplicar la proyección lineal a cualquier otro dato $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^D$ hay que restarle previamente la media estimada en el paso 1

Diagonalización y varianza

- En general PCA es el proceso que diagonaliza la matriz de covarianzas:

$$\Sigma_{\mathcal{X}} W = W \Lambda \quad \rightarrow \quad \Sigma_{\mathcal{X}} = W \Lambda W^t \rightarrow \quad \Lambda = W^t \Sigma_{\mathcal{X}} W$$

  donde:
  - $\Sigma_{\mathcal{X}} \in \mathbb{R}^{D \times D}$ es la matriz de covarianza de los datos
  - $W \in \mathbb{R}^{D \times D}$ es la matriz con todos los vectores propios
  - $\Lambda \in \mathbb{R}^{D \times D}$ es una matriz diagonal con los todos valores propios

- Λ es la matriz de covarianzas de los datos proyectados por $W \in \mathbb{R}^{D \times D}$

- Los datos proyectados están decorrelados (covarianzas nulas), y la varianza de estos datos en la dimensión j es $\Lambda_{jj} = \lambda_j$

- La varianza total acumulada de los datos proyectados a k dimensiones es:

$$\sum_{j=1}^{k} \Lambda_{jj} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j$$

Consideraciones prácticas

- Sean:
  - $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_N\}$, datos de entrenamiento
  - $\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \mathbf{x}_n$, media de dichos datos
  - $A_{D\times N} = (\mathbf{x}_1 - \overline{\mathbf{x}}, \mathbf{x}_2 - \overline{\mathbf{x}}, \ldots, \mathbf{x}_N - \overline{\mathbf{x}})$
- $\Sigma_{\mathcal{X}}$ puede expresarse como $\Sigma_{\mathcal{X}} = \frac{1}{N}AA^t$
- PCA consiste en obtener W y Λ que diagonalicen $\Sigma_{\mathcal{X}}$
- Problema: cuando $N \ll D$
  - $\Sigma_{\mathcal{X}}$ no tendrá más de N vectores propios
  - Almacenar $\Sigma_{\mathcal{X}} \in \mathbb{R}^{D\times D}$ puede ser problemático con D grande
- Solución: diagonalizar $\Sigma'_{\mathcal{X}} = \frac{1}{D}A^tA$, con $\Sigma'_{\mathcal{X}} \in \mathbb{R}^{N\times N}$
- Pero hay que obtener obtener W y Λ que diagonalicen $\Sigma_{\mathcal{X}}$

Consideraciones prácticas

- Método:
  - Obtener W' y Λ' de la diagonalización de $\Sigma'_{\mathcal{X}}$
  - Expresarlo en términos de la diagonalización de $\Sigma_{\mathcal{X}}$

$$\Sigma'_{\mathcal{X}} W' = \frac{1}{D} A^t A W' = W' \Lambda'$$

  multiplicamos ambas partes de la igualdad por $\frac{D}{N} A$

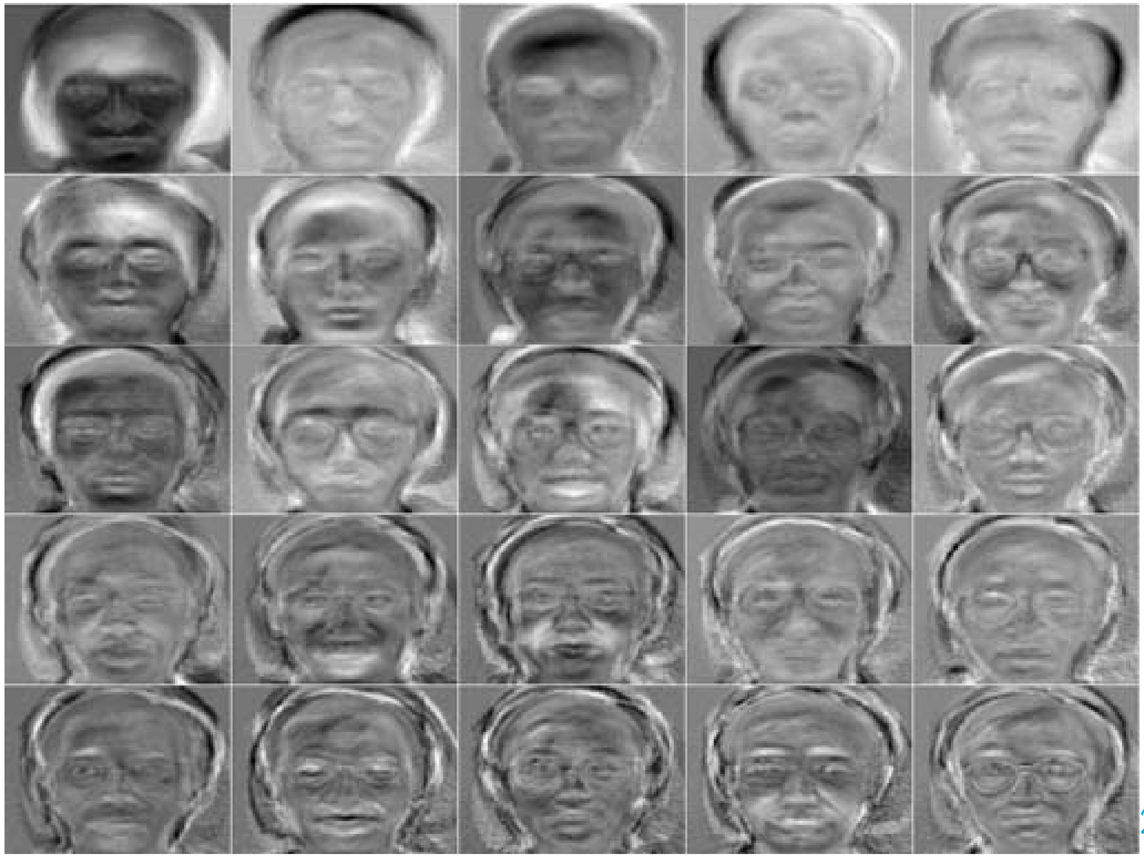
$$\boxed{\tfrac{1}{N} A A^t} A W' = \frac{D}{N} A W' \Lambda' \quad \longrightarrow \quad \Sigma_{\mathcal{X}} \quad \underset{\displaystyle W}{\underset{\downarrow}{\boxed{A W'}}} = \boxed{A W'} \quad \underset{\displaystyle \Lambda}{\underset{\downarrow}{\boxed{\tfrac{D}{N} \Lambda'}}}$$

- Por tanto, $W = A W'$, $\Lambda = \frac{D}{N} \Lambda'$
- Los vectores propios obtenidos son ortogonales pero no ortonormales
- Se debe dividir cada vector por su módulo para obtener vectores ortonormales

Índice

Aplicación de PCA: EigenFaces

- Muestras $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_N\}$ que representan imágenes de caras
- Representación global: $\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^D$, con D número de píxeles de la imagen
- Los vectores propios de la matriz de covarianza tienen esta apariencia:

[2]

[2] Imágenes de http://www.chrisdecoro.com/eigenfaces/

Aplicación de PCA: EigenFaces

- Toda imagen $\mathbf{x}_n$ puede ser reconstruida como una suma ponderada de los k primeros vectores propios (imágenes) $\hat{\mathbf{x}}_n = \overline{\mathbf{x}} + WW^t(\mathbf{x}_n - \overline{\mathbf{x}})$
- A mayor valor de k mejor reconstrucción:

Resultado de la reconstrucción usando $k = 1 \ldots 25$ vectores propios

Aplicación de PCA: EigenFaces

- En general, se puede reconstruir cualquier imagen del mismo tamaño que las imágenes empleadas en la obtención de los vectores propios
- La reconstrucción siempre tenderá a ser una cara: