UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS
FACULTAD DE CIENCIAS PURAS Y NATURALES
CARRERA DE INFORMÁTICA

¿Cómo funciona PCA ?

Algebra Lineal

Responsable: Badani Dávalos Kassandra Andrea

Asignatura: Inteligencia Artificial (INF-354)

Fecha: 9 de diciembre

La Paz – Bolivia

2024

Análisis de Componentes Principales (PCA)

El **Análisis de Componentes Principales (PCA)** es una técnica estadística utilizada para reducir la dimensionalidad de un conjunto de datos, manteniendo la mayor cantidad posible de variabilidad (información) original. Se usa comúnmente en análisis de datos y aprendizaje automático, especialmente con datos de alta dimensión.

1. Datos en el espacio de características

Supongamos que tienes un conjunto de datos con (n) observaciones y (d) características. Estos datos pueden representarse mediante una matriz (X) de tamaño (n \times d), donde cada fila es una observación y cada columna es una característica.

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

2. Centro de los datos

Antes de aplicar PCA, es necesario centrar los datos. Esto significa restar la media de cada característica de todos los puntos de esa característica, de modo que el centro de los datos quede en el origen. Esto se hace calculando la media de cada columna de la matriz (X), y restándola de cada elemento de esa columna.

La media de cada característica (j) es:

$$\text{media}(X_j) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}$$

Entonces, la matriz centrada (X_{\text{centrado}}) se obtiene restando la media de cada característica a cada observación:

$$X_{\text{centrado}} = X - \text{media}(X)$$

3. Cálculo de la matriz de covarianza

La matriz de covarianza (Σ) describe cómo las diferentes características del conjunto de datos varían conjuntamente. Se calcula a partir de la matriz centrada (X_{centrado}) como:

$$\Sigma = \frac{1}{n-1} X_{\text{centrado}}^T X_{\text{centrado}}$$

Aquí, (X_{centrado}^T) es la transpuesta de la matriz centrada, y (Σ) es una matriz ($d \times d$) que describe las relaciones de covarianza entre las características.

4. Descomposición en autovalores y autovectores

PCA se basa en la descomposición de la matriz de covarianza (Σ) en autovectores y autovalores. Los autovectores indican las direcciones principales (o "componentes principales") a lo largo de las cuales los datos tienen la mayor varianza, y los autovalores indican la magnitud de esa varianza.

Matemáticamente, esto implica resolver el problema:

$$\Sigma v = \lambda v$$

donde:

- $\sum$ es la matriz de covarianza,
- v es un autovector,
- λ es el autovalor correspondiente.

Los autovectores corresponden a las direcciones principales de los datos, y los autovalores indican la "importancia" de cada componente principal. Los autovectores con los autovalores más grandes corresponden a las direcciones de mayor variabilidad en los datos.

5. Ordenar y seleccionar los componentes principales

Una vez calculados los autovectores y autovalores, se ordenan los autovectores según sus autovalores, de mayor a menor. Los autovectores correspondientes a los autovalores más grandes son los más importantes para capturar la variabilidad en los datos.

Si deseas reducir la dimensionalidad de los datos a (k) dimensiones, seleccionas los primeros (k) autovectores con los (k) autovalores más grandes. Estos autovectores forman una nueva base para los datos.

6. Proyección de los datos originales

Finalmente, los datos originales se proyectan en el subespacio formado por las componentes principales seleccionadas. Esto se hace multiplicando la matriz centrada de los datos por la matriz de autovectores seleccionados.

Si (V_k) es la matriz de (k) autovectores seleccionados, la proyección de los datos originales (X_{\text{centrado}}) sobre las componentes principales es:

$$X_{\text{PCA}} = X_{\text{centrado}} V_k$$

El resultado, (X_{\text{PCA}}), es una nueva representación de los datos en el espacio reducido de (k) dimensiones.

Resumen del proceso PCA:

1. **Centra los datos** (restando la media de cada característica).
2. **Calcula la matriz de covarianza** de los datos centrados.
3. **Obtén los autovectores y autovalores** de la matriz de covarianza.
4. **Ordena los autovectores** por sus autovalores de mayor a menor.
5. **Selecciona los primeros (k) autovectores** para reducir la dimensionalidad.
6. **Proyecta los datos originales** sobre el subespacio formado por los (k) autovectores seleccionados.

Intuición de PCA:

- Los **componentes principales** (autovectores) son las direcciones en las que los datos muestran la mayor variabilidad.
- Al seleccionar solo las primeras (k) componentes principales, se pierde la menor cantidad posible de información, pero se reduce la cantidad de dimensiones.
- **PCA** es una técnica lineal que transforma el espacio de características original a uno nuevo, en el que las nuevas dimensiones están ordenadas según la varianza de los datos.

Aplicaciones de PCA:

- **Reducción de dimensionalidad**: Para visualización de datos (por ejemplo, reducir de 1000 dimensiones a 2 o 3 para gráficos).
- **Compresión de datos**: Para almacenar o procesar datos más eficientemente.

- **Eliminación de ruido**: Al eliminar dimensiones con baja varianza, se puede eliminar parte del ruido.

PCA es fundamental en muchos campos, como el análisis de imágenes, el procesamiento de señales y la minería de datos, donde la reducción de la dimensionalidad facilita el análisis y la interpretación de los datos.

Ejemplo

Supongamos que tenemos un conjunto de datos de 3 puntos en un espacio de 2 dimensiones (2 características). Los datos son:

$$\text{Datos} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

Cada fila es una observación, y las columnas representan las dos características (por ejemplo, "X1" y "X2").

Paso 1: **Centro de los datos**

Antes de aplicar PCA, primero centramos los datos. Esto significa restar la media de cada característica de todos los puntos de esa característica. Calculamos las medias de cada columna:

$$\text{Media de X1} = \frac{2+3+4}{3} = 3$$

$$\text{Media de X2} = \frac{3+4+5}{3} = 4$$

Restamos la media de cada columna:

$$X_{\text{centrado}} = \begin{pmatrix} 2-3 & 3-4 \\ 3-3 & 4-4 \\ 4-3 & 5-4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Ahora tenemos los datos centrados. La media de cada columna es 0.

Paso 2: **Matriz de covarianza**

Calculamos la matriz de covarianza de los datos centrados. La fórmula para la matriz de covarianza ∑ es:

$$\Sigma = \frac{1}{n-1} X_{\text{centrado}}^T X_{\text{centrado}}$$

Donde (n = 3) (el número de observaciones). Primero, calculemos el producto

$$X_{\text{centrado}}^T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Multiplicamos:

$$X_{\text{centrado}}^T X_{\text{centrado}} = \begin{pmatrix} (-1)(-1)+(0)(0)+(1)(1) & (-1)(0)+(0)(0)+(1)(1) \\ (-1)(-1)+(0)(0)+(1)(1) & (-1)(0)+(0)(0)+(1)(1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Ahora dividimos por (n-1 = 2):

$$\Sigma = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Paso 3: **Autovalores y autovectores**

Ahora, resolvemos la ecuación de autovalores (\Sigma v = \lambda v), para encontrar los autovectores y autovalores on simplemente los vectores unitarios:

$$\text{Autovectores} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Los autovectores de la matriz de covarianza serán las componentes principales, y los autovalores nos indican cuánta varianza hay en cada una de esas direcciones. Para este caso, la matriz de covarianza tiene autovalores λ1 = 2) y (λ2 = 2), con los autovectores correspondientes como (v_1 = \begin{pmatrix} 1 \ 0 \end{pmatrix}) y (v_2 = \begin{pmatrix} 0 \ 1 \end{pmatrix}).

Paso 4: Ordenar los autovectores

En este caso, ambos autovectores tienen el mismo autovalor, por lo que no necesitamos hacer ningún reordenamiento. El primer componente principal es el autovector $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y el segundo componente principal es $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Paso 5: Proyección de los datos
Proyectamos los datos centrados en los componentes principales. Dado que los autovectores son simplemente $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, la proyección de los datos sobre los componentes principales será simplemente las coordenadas originales en el espacio de características.

$$X_{\text{PCA}} = X_{\text{centrado}} V_k$$

Donde V_k es la matriz de autovectores seleccionados. En este caso, la matriz de autovectores es la matriz identidad:

$$V_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Por lo tanto, la proyección X_{PCA} es:

$$X_{\text{PCA}} = X_{\text{centrado}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = X_{\text{centrado}}$$

Es decir, los datos no se transforman porque los componentes principales son simplemente las direcciones originales de las características.

Paso 6: Interpretación
En este caso, dado que las características originales están perfectamente alineadas con las componentes principales, no hay reducción de dimensionalidad y los datos no cambian al proyectarlos sobre las componentes principales. La varianza de los datos está distribuida uniformemente entre las dos dimensiones, lo que significa que cada componente tiene la misma importancia.

Proyección de los datos: Los datos originales proyectados sobre los componentes principales no cambian porque las características originales son las mismas.
Este ejemplo es simplificado, pero ilustra cómo PCA funciona para encontrar las direcciones principales de variabilidad en los datos y proyectarlos sobre esas direcciones.