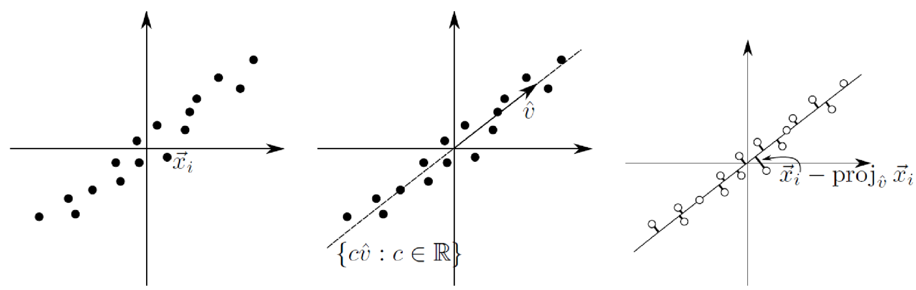
Metodi Numerici per l'Informatica

Anthony

18 apr 2023

1 Principal Component

Consideriamo i seguenti dati che vivono in $\mathbb{R}^2$:



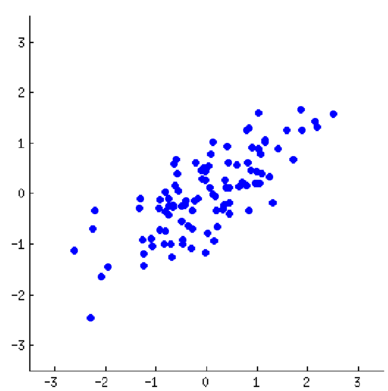
(a) Input data (b) Principal axis (c) Projection error

Vogliamo trovare il vettore $\mathbf{v}$ tale che, per ogni data point $\mathbf{x}_i$, esso può essere scritto come:

$$\mathbf{x}_i = c_i \mathbf{v}$$

In altre parole, la distanza di ogni punto dalla retta misurata lungo la componente ortogonale della retta stessa deve essere più piccola possibile. Vogliamo minimizzare tale somma delle distanze.

Un'altra prospettiva Supponiamo di avere n punti nella matrice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{d \times n}$:



Vogliamo approssimare i punti della matrice $\mathbf{X}$ in una matrice con meno dimensioni $\tilde{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{k\times n}$ con $k \ll d$.

$$\mathbf{X}^T = \begin{pmatrix} — & \mathbf{x}_1^T & — \\ & \vdots & \\ — & \mathbf{x}_n^T & — \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} - & \mathbf{x}_1^T & - \\ & \vdots & \\ - & \mathbf{x}_n^T & - \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{X}}^T$$

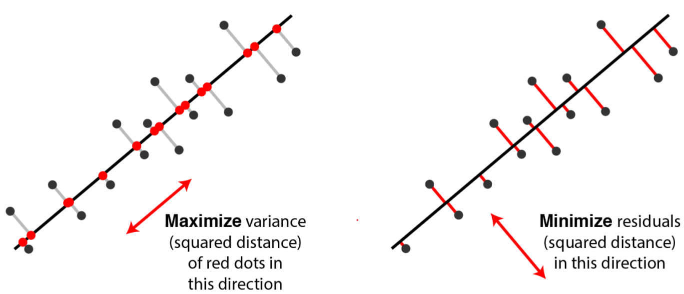
Vogliamo quindi trovare le $k \leq d$ direzioni ortogonali con la maggior varianza. Esse spannano il sottospazio k-dimensionale dei dati, poi vogliamo proiettare tutti i punti verso queste direzioni. Ciò induce a perdita di informazione, ma possiamo farlo con la minor perdita possibile.

2 PCA

In generale, applicando PCA vogliamo identificare i $k \ll d$ assi per i quali, una volta proiettato il nostro dataset originale, minimizzano la perdita di informazione. Intuitivamente, gli assi che minimizzano la perdita di informazione sono ortogonali fra loro. Vogliamo quindi trovare la direzione $\mathbf{w}$ tale che:

- Minimizza l'errore di proiezione/ricostruzione
- Massimizza la varianza dei dati proiettati

Le due proprietà sono dunque equivalenti:



Ovvero, trovare l'asse che minimizza l'errore di proiezione è equivalente a trovare un asse che massimizza la varianza dei dati. Possiamo pensare al PCA come a un cambio di base a meno dimensioni.

2.1 Notazione matriciale

Dati $\mathbf{x}_i$ i punti e $\mathbf{w}_i$ le assi, possiamo esprimere il problema in notazione matriciale:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} — & \mathbf{x}_1^T & — \\ & \vdots & \\ — & \mathbf{x}_n^T & — \end{pmatrix}}_{n\times d} \underbrace{\begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{w}_1 & \dots & \mathbf{w}_k \\ | & & | \end{pmatrix}}_{d\times k} = \underbrace{\begin{pmatrix} — & \mathbf{z}_1^T & — \\ & \vdots & \\ — & \mathbf{z}_n^T & — \end{pmatrix}}_{n\times k}$$

Il prodotto interno ci consente di proiettare i punti nelle k dimensioni del dataset originale. Questa proiezione può avvenire solo se le dimensioni sono ortogonali tra di loro.
Assumendo che $\mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I}$, per $k < d$ otteniamo:

$$\mathbf{X}^T\mathbf{W} = \mathbf{Z}^T \quad \text{proiezione}$$

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{W}\mathbf{Z} \quad \text{ricostruzione}$$

Le due formule sono equivalenti:

$$\mathbf{X}^T\mathbf{W} = \mathbf{Z}^T \tag{1}$$

$$= \mathbf{X}^T\mathbf{W}\mathbf{W}^T = \mathbf{Z}^T\mathbf{W}^T \tag{2}$$

$$= \mathbf{X}^T = \mathbf{Z}^T\mathbf{W}^T \tag{3}$$

$$= \mathbf{X} = \mathbf{W}\mathbf{Z} \tag{4}$$

Se $\mathbf{W}$ non è quadrata, presenta comunque k colonne ortogonali. Una matrice $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{d\times k}$ si dice *semiortogonale* se $\mathbf{W}^T\mathbf{W} = \mathbf{I}_k$, ovvero il prodotto con la sua trasposta è pari all'identità k-dimensionale. Poiché $\mathbf{W}$ non è una matrice quadrata, l'operazione $\mathbf{W}\mathbf{W}^T \approx \mathbf{I}_d$, ovvero non è necessariamente un'identità a d dimensioni. Questo rende valida l'equazione di proiezione, tuttavia il passaggio (3) non è più del tutto valido. In virtù dell'approssimazione, possiamo dire $\mathbf{X} \approx \mathbf{W}\mathbf{Z}$. Questo step è quello di ricostruzione poiché, data $\mathbf{W}\mathbf{Z}$, ricostruiamo $\mathbf{X}$ effettuando una trasformazione lineare.

3 Risolvere PCA

Assumendo che abbiamo dei data points $\mathbf{X}$ centrati in zero, per un certo $\mathbf{w}$, la proiezione degli n punti su $\mathbf{w}$ è $\mathbf{X}^T\mathbf{w}$. La varianza da massimizzare è $\|\mathbf{X}^T\mathbf{w}\|_2^2$:

$$(\mathbf{X}^T\mathbf{w})^T(\mathbf{X}^T\mathbf{w}) = \mathbf{w}^T \underbrace{\mathbf{X}\mathbf{X}^T}_{\mathbf{C}} \mathbf{w}$$

I cui $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ è la matrice simmetrica di covarianza. Vogliamo massimizzare la covarianza, quindi vogliamo risolvere il problema:

$$\max_{\mathbf{w}} \mathbf{w}^T\mathbf{C}\mathbf{w} \quad \text{t.c. } \|\mathbf{w}\|_2^2 = 1$$

La soluzione è proprio $\mathbf{w}$, l'autovettore principale di $\mathbf{C}$ per il principio min-max. Il suo autovalore corrispondente è $\mathbf{w}^T\mathbf{C}\mathbf{w}$.

3.1 Trovare più componenti principali

Dopo aver risolto il problema:

$$\mathbf{w}_1 = \arg\max_{\mathbf{w}} \mathbf{w}^T\mathbf{C}\mathbf{w} \quad \text{t.c. } \|\mathbf{w}\|_2^2 = 1$$

Per trovare la successiva direzione ortogonale possiamo aggiungere un nuovo vincolo al problema:

$$\mathbf{w}_1 = \arg\max_{\mathbf{w}} \mathbf{w}^T\mathbf{C}\mathbf{w} \quad \text{t.c. } \|\mathbf{w}\|_2^2 = 1 \text{ e } \mathbf{w}_1^T\mathbf{w} = 0$$

Ciò ci restituisce il secondo autovettore di $\mathbf{C}$. Iterando possiamo trovare i primi k autovettori, che corrispondono alle componenti principali di $\mathbf{C}$.

4 PCA come modello generativo

Dato un certo $\mathbf{W}$ che soddisfa le seguenti osservazioni su $\mathbf{X}$:

$$\mathbf{X}^T\mathbf{W} = \mathbf{Z}^T \quad \text{proiezione}$$

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{W}\mathbf{Z} \quad \text{ricostruzione}$$

possiamo generare nuovi dati campionando $\mathbf{z_{new}} \in \mathbb{R}^k$ risolvendo:

$$\mathbf{x_{new}} = \mathbf{W}\mathbf{z_{new}}$$