Aplicación de la descomposición en valores singulares al análisis de datos

David Moreno Maldonado

Tutora: Amparo Baíllo Moreno

Trabajo de Fin de Grado
Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas
Universidad Autónoma de Madrid

2 Junio, 2020

Esta presentación es una adaptación con los comentarios por escrito a la presentación en vídeo que se puede ver en `https://www.youtube.com/watch?v=fRixWFnNtB0`. Los comentarios extra aparecerán a lo largo de la presentación en este mismo color y, en general, sirven para aclarar y comentar los resultados obtenidos a lo largo del trabajo y que se comentan de manera oral en el vídeo.

Se recomienda encarecidamente la visualización del mismo en vez de esta presentación en caso de ser posible y únicamente usar esta presentación como último recurso.

- Nuestra capacidad de recolectar y almacenar grandes cantidades de datos observados ha aumentado enormemente.
- Reducir la dimensión de los datos puede facilitar el análisis de la información muestral.
- La descomposición en valores singulares (SVD) es una técnica que permite resumir y comprimir la información contenida en la matriz de datos.
- Las técnicas estudiadas que hacen uso de la SVD son:
  - Componentes principales.
  - Correlaciones canónicas.
  - Aproximación y compleción de matrices.
- Se ha estudiado la base teórica detrás de cada una de las técnicas y, después, se han aplicado en datos reales y actuales.

Definición

La **descomposición en valores singulares** *(SVD) de una matriz* $\mathbf{A}$ *de dimensiones* $m \times n$ *es la factorización*

$$\mathbf{A} = \mathbf{UDV}'$$

donde:

- $\mathbf{U}$ *es una matriz* $m \times n$ *ortogonal* ($\mathbf{U}'\mathbf{U} = \mathbf{I}_n$) *cuyas columnas* $\mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^m$ *son los autovectores ortonormales de* $\mathbf{AA}'$;
- $\mathbf{V}$ *es una matriz* $n \times n$ *ortogonal* ($\mathbf{V}'\mathbf{V} = \mathbf{I}_n$) *cuyas columnas* $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^n$ *son los autovectores ortonormales de* $\mathbf{A}'\mathbf{A}$;
- $\mathbf{D}$ *es* $n \times n$ *y diagonal, cuyos componentes de la diagonal* $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq 0$ *son los valores singulares de la matriz.*

Los valores singulares de $\mathbf{A}$ que son no nulos coinciden con la raíz cuadrada de los autovalores no nulos de $\mathbf{A}'\mathbf{A}$ o $\mathbf{AA}'$.

Componentes principales

Definición

Las **componentes principales** *de una matriz de datos* $\mathbf{X}$ *con* n *observaciones* p*-variantes son las combinaciones lineales incorreladas* $\mathbf{Y}_1 = \mathbf{X}\mathbf{t}_1, \ldots, \mathbf{Y}_p = \mathbf{X}\mathbf{t}_p$ *tales que la varianza muestral de cada* $\mathbf{Y}_i$ *es máxima condicionado a* $\mathbf{t}_i'\mathbf{t}_i = 1$ *y a que* $cov(\mathbf{Y}_i, \mathbf{Y}_j) = 0$ *para todo* $j < i$

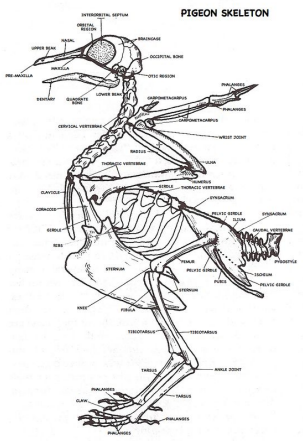
Utilizamos la descomposición espectral, un caso particular de la SVD para matrices simétricas, para determinar de las componentes principales.

Teorema

Dada la matriz de covarianzas muestral $\mathbf{S}$ *de la matriz de datos* $\mathbf{X}$*, si obtenemos su descomposición espectral* $\mathbf{S} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{U}'$*, las componentes principales de* $\mathbf{X}$ *son las combinaciones lineales* $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{U}\mathbf{D}$.

Descripción de los datos

- Se disponen un total de 413 observaciones de diferentes tipos de aves.
- Las medidas disponibles se corresponden a la longitud y el diámetro de estos huesos:
  - Húmero
  - Cúbito
  - Fémur
  - Tibiotarso
  - Tarsometatarso



- Se realizará un análisis por separado de las longitudes y de los diámetros.

Resultados longitudes de los huesos

Criterio del porcentaje: Dados los porcentajes acumulados que cada componente principal $\mathbf{Y}_i$ explica de la variabilidad total, $P_i = 100\frac{\sigma_1+\cdots+\sigma_m}{\sigma_1+\cdots+\sigma_p}$; podemos especificar un porcentaje r y tomar las m primeras componentes principales tal que $P_m > r$

Variable	**CP1**	**CP2**	**CP3**	**CP4**	**CP5**
Húmero	0.602	-0.200	0.472	-0.266	-0.551
Cúbito	0.649	-0.434	-0.369	0.304	0.403
Fémur	0.187	0.257	-0.674	-0.649	-0.154
Tibiotarso	0.375	0.668	0.351	-0.117	0.525
Tarsometatarso	0.202	0.509	-0.250	0.635	-0.484
Porcentaje de variación	89.81%	7.98%	1.19%	0.68%	0.31%
Porcentaje acumulado	89.81%	97.79%	98.99%	99.68%	100%

Comentarios sobre estos resultados en la siguiente transparencia

Comentarios resultados longitudes de los huesos

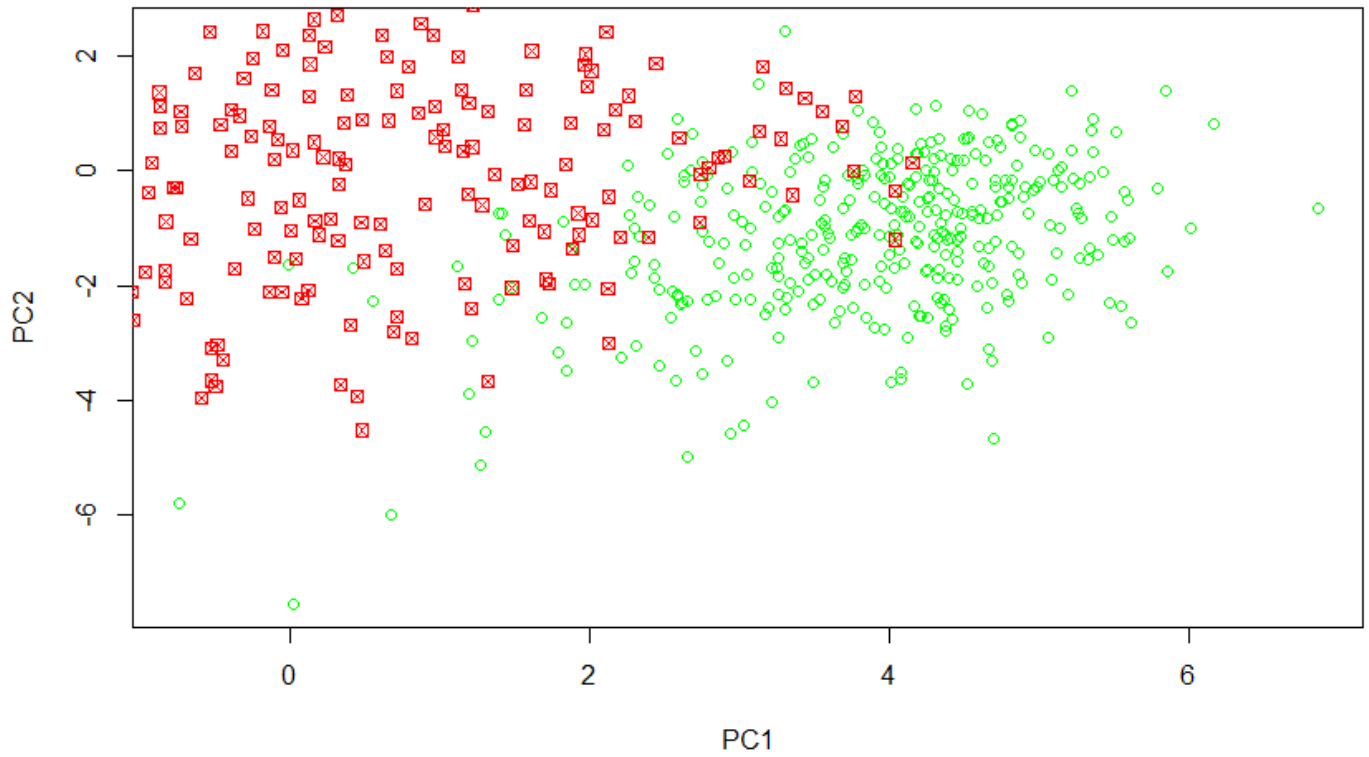
1. Existen diferentes criterios para decidir que componentes principales seleccionamos. En nuestro caso, utilizamos el criterio del porcentaje con un umbral del 95%, seleccionando así las dos primeras componente principales.
2. Podemos aplicar en este caso el teorema de Perron, estudiado en la memoria. Este dice que al aplicar componentes principales a una matriz totalmente positiva (como la matriz de covarianzas de las longitudes de los huesos) la primera componente principal será enteramente positiva y será la única que cumpla esto.
3. La primera componente principal es la componente de tamaño y vemos que es más significativo el tamaño de los huesos de las alas (húmero y cúbito) que el de los de las patas (fémur, tibiotarso y tarsometatarso).
4. La segunda componente es la de forma ya que contrapone las medidas de los huesos de las alas con los de las patas.

Descripción de los datos

Imágenes digitalizadas de biopsias de senos. Las medidas tomadas se corresponden con el núcleo celular y son las siguientes:

- Radio: Media de las distancias del centro al perímetro.
- Textura: Desviación estándar de la escala de grises de la imagen.
- Perímetro.
- Área.
- Suavidad: Variación local de la longitud del radio.
- Compacidad: $\frac{\text{perimetro}^2}{\text{area}-1}$.
- Concavidad: Agudeza de las porciones cóncavas del contorno.
- Puntos de concavidad: Número de porciones cóncavas del contorno.
- Simetría.
- Dimensión fractal.

Aplicación de la transformación por componentes principales de células malignas.



Comentarios sobre estos resultados en la siguiente transparencia

Comentarios resultados medidas de células

1. Realizando un análisis por componentes principales para las células malignas análogo al de las medidas biométricas de aves, diferenciamos también dos componentes principales: la de tamaño y la de forma, que diferencia entre células redondeadas u onduladas.
2. Aplicamos la transformación por componentes principales a todo el conjunto de datos y mostramos en verde las células benignas y en rojo las células malignas.
3. En el gráfico se puede apreciar que existe una tendencia que puede permitir separar las benignas de las malignas y detectarlas en función de su tamaño y forma.
4. Se realiza un proceso análogo con resultados similares para el análisis por componentes principales de las células benignas.

Correlaciones canónicas (1/2)

Sean $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}$ dos matrices $n \times p$ y $n \times q$, respectivamente, de observaciones de dos vectores en una muestra de n individuos.
Existen $m = \min(p, q)$ pares de vectores canónicos $\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{a}_m, \mathbf{b}_m$ que proporcionan:

$$\begin{array}{ccc} U_1 = \mathbf{X}\mathbf{a}_1, & V_1 = \mathbf{Y}\mathbf{b}_1, & r_1 = \mathrm{cor}(U_1, V_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ U_m = \mathbf{X}\mathbf{a}_m, & V_m = \mathbf{Y}\mathbf{b}_m, & r_m = \mathrm{cor}(U_m, V_m) \end{array}$$

de tal manera que cada r_i es máxima en cada caso y $\mathrm{cor}(U_i, U_j) = 0$ y $\mathrm{cor}(V_i, V_j) = 0$ para todo $j < i$.
Cada par de U_i y V_i definen las i-ésimas **variables canónicas** y cada r_i es la i-ésima **correlación canónica**.

Correlaciones canónicas (2/2)

Denotamos $\mathbf{S}_{11}$ y $\mathbf{S}_{22}$ las matrices de covarianzas muestrales de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{Y}$, respectivamente. Y las matrices de covarianzas cruzadas $\mathbf{S}_{12} = \mathbf{S}_{21}'$. Consideramos la matriz $p \times q$:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{S}_{11}^{-1/2}\mathbf{S}_{12}\mathbf{S}_{22}^{-1/2},$$

Sea $\mathbf{Q} = \mathbf{UDV}'$ la descomposición en valores singulares de esta matriz.

Teorema

Los vectores canónicos y correlaciones canónicas son

$$\mathbf{a}_i = \mathbf{S}_{11}^{-1/2}\mathbf{u}_i, \quad \mathbf{b}_i = \mathbf{S}_{22}^{-1/2}\mathbf{u}_i, \quad r_i = \sigma_i,$$

donde $\mathbf{u}_i$ *son las columnas de* $\mathbf{U}$ *y* $\mathbf{D} = diag(\sigma_1, \sigma_2, \ldots)$ *con* $\sigma_i \geq \sigma_{i+1}$ *para todo* i.

Índices sobre el nivel educativo

Aplicamos el análisis de correlaciones canónicas a dos grupos de variables: indicadores del nivel educativo en esta transparencia e índices de las libertades y derechos de la mujer en la siguiente.

- ALF-JOVEN = Ratio de alfabetismo en mujeres jóvenes (% de mujeres entre 15 y 24 años).
- ALF-ADULTA = Ratio de alfabetismo en mujeres adultas (% de mujeres mayores de 15 años).
- EST-PROF-PRIM = Ratio estudiante-profesor en educación primaria.
- EST-PROF-SEC = Ratio estudiante-profesor en educación secundaria.
- INSC-PRIM = Porcentaje de inscripción femenino en educación primaria.
- INST-SEC = Porcentaje de inscripción femenino en educación secundaria.
- PROFESORAS = Porcentaje de profesoras en la educación secundaria.

Índices sobre los derechos y libertades de las mujeres

Indican el porcentaje de mujeres que creen que está justificado que su marido la golpee si:

- Ella discute con él. (DISCUTIR)
- A ella se le quema la comida.(COMIDA)
- Ella desatiende a los hijos. (HIJOS)
- Ella sale de casa sin consultárselo. (SALIR)
- Ella se niega a mantener relaciones sexuales con él. (RELACIONES)

Resultados de la aplicación de correlaciones canónicas

Variable	**CC1**	**CC2**
ALF-JOVEN	-0.023	-0.030
ALF-ADULTA	0.009	0.019
EST-PROF-PRIM	0.006	-0.010
EST-PROF-SEC	0.004	0.007
INSC-PRIM	-0.002	0.011
INSC-SEC	0.008	0.000
PROFESORAS	-0.001	0.006
DISCUTIR	-0.027	-0.028
COMIDA	0.032	0.010
HIJOS	-0.031	0.001
SALIR	0.040	0.024
RELACIONES	-0.002	-0.019
Correlación canónica	0.928	0.856

1. Existe una correlación muy alta entre estos dos grupos de variables, muestra de ello es el alto valor que alcanzan la primera y la segunda correlación canónica.
2. Podemos destacar el papel de la alfabetización de las mujeres jóvenes dado el peso que obtiene esta variable en ambas variables canónicas.

Problema aproximación de matrices

Sea una matriz $\mathbf{A}$ de dimensiones $m \times n$, el problema de optimización para aproximarla es

$$\hat{\mathbf{A}} = \underset{\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{m \times n}}{\arg\min} \|\mathbf{A} - \mathbf{M}\|^2 \text{ sujeto a } \Phi(\mathbf{M}) \leq c,$$

donde la función Φ sirve para establecer una restricción que hace que la matriz $\hat{\mathbf{A}}$ tenga muchos ceros (*sparse*).

Teorema de la aproximación

Teorema

Dada una matriz $\mathbf{A}$ *de dimensiones* $m \times n$*, la matriz de rango menor o igual que* k *(expresada en la forma* $\sum_{i=1}^{k} \mathbf{x}_i \mathbf{y}_i'$*) que mejor aproxima a* $\mathbf{A}$*, en el sentido de que minimiza el error de aproximación*

$$\left|\left| \mathbf{A} - \sum_{i=1}^{k} \mathbf{x}_i \mathbf{y}_i' \right|\right|$$

donde $||\mathbf{A}||$ *es la norma de Frobenius de* $\mathbf{A}$*, viene dada por los* k *primeros términos de la SVD de la matriz* $\mathbf{A}$*,* $\mathbf{A}_k$*.*

Resolvemos el problema de la aproximación tomando:

$$\mathbf{M} = \mathbf{A}_k, \ \Phi(\mathbf{M}) = \text{rank}(\mathbf{M}) \text{ y } c = k \leq \text{rank}(\mathbf{A})$$

Problema de compleción de matrices

Sea $\mathbf{A}$ la matriz con datos en un subconjunto $\Omega \subset \{1, \ldots, m\} \times \{1, \ldots, n\}$ y $\mathbf{M}$ una aproximación, el problema de optimización para la compleción de matrices es

$$\min_{\text{rank}(\mathbf{M}) \leq r} \sum_{(i,j) \in \Omega} (a_{ij} - m_{ij})^2.$$

- El problema es no convexo y las soluciones globales no son posibles de manera general.
- Existen heurísticas que permiten encontrar mínimos locales de manera efectiva utilizando una estimación inicial.

Algoritmo iterativo del paquete `SoftImpute` de R para compleción de matrices

Sea $\mathbf{A} = (a_{ij})$ la matriz con datos observados en un subconjunto $\Omega \subset \{1, \ldots, m\} \times \{1, \ldots, n\}$, $\mathbf{M} = (m_{ij})$ una estimación inicial de los valores faltantes de $\mathbf{A}$ y $P_\Omega(\mathbf{A})$ la matriz con los valores de Ω mantenidos como en $\mathbf{A}$ y el resto igualados a 0. El algoritmo seguido es:

1. $\mathbf{Z} = P_\Omega(\mathbf{A}) + P_{\Omega^\perp}(\mathbf{M})$
2. Hallamos la SVD $\mathbf{Z} = \mathbf{UDV}'$
3. Obtenemos la matriz $\mathbf{D}_k$, igual a la matriz $\mathbf{D}$, pero igualando a cero todos los valores singulares que no sean los k primeros.
4. Construimos $\mathbf{Z}_k = \mathbf{UD}_k\mathbf{V}'$
5. Actualizamos la matriz $\mathbf{M} = \mathbf{Z}_k$

Datos de películas utilizados

Pulp fiction	Los juegos del hambre	Interestellar	El corredor del laberinto	El lobo de Wall Street	El viaje de Chihiro	Seven
4	3	5	2	4	5	5
4	2	5	2	5	4	4
5	3	5	3	4	4	4
3	3	5	2	4	5	4
4	3	1	1	3	4	N/A
4	3	N/A	N/A	3	4	4
5	2	5	2	4	5	5
4	3	5	3	4	3	3
5	3	4	1	3	4	4
4	2	5	4	N/A	5	N/A
4	4	4	4	4	4	4
5	4	5	N/A	5	5	5
5	1	4	N/A	4	N/A	4

Comentarios sobre esta tabla en la siguiente transparencia

Comentarios sobre la aplicación de SoftImpute

1. Se pretende realizar una recreación a menor escala del famosos problema de Netflix para crear un recomendador de contenido. Se puede consultar en profundidad en la memoria.
2. Se han recopilado datos de diferentes películas mediante su valoración entre 1 y 5 puntos.
3. Existen datos faltantes (N/A) y hemos añadido más eliminando algunos de los observados. De esta manera, podemos observar como de buena es la aproximación obtenida.

Resultados de la aplicación de `SoftImpute`

Rango máximo	Iteraciones hasta convergencia	Diferencia total	Diferencia media	Diferencia mínima	Diferencia máxima
1	6	8.505	1.063	0.288	1.891
2	12	17.157	2.145	0.254	6.112
3	26	19.073	2.384	0.052	7.626
4	24	29.593	3.699	0.248	6.662
5	50	27.593	3.449	1.234	6.491
6	15	30.165	3.771	0.661	6.542

En este ejemplo, la mejor aproximación se consigue usando una restricción de rango igual a 1. No solo se consigue con esto que el algoritmo converja en el menor numero de iteraciones, sino que la diferencia total con la matriz observada (siendo esta la distancia de Frobenius) es la menor de todos los rangos probados.

Muchas gracias.