Método de la Potencia y PCA

Métodos Numéricos

1 Cuatrimestre 2023

Autovalores y Autovectores

Definición

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Un *autovector* de A es un vector no nulo tal que $Ax = \lambda x$, para algun escalar λ. Un escalar λ es denominado *autovalor* de A si existe una solución no trivial x del sistema $Ax = \lambda x$. En este caso, x es llamado *autovector asociado a* λ.

Consideramos:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, u = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, v = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$Au = \begin{bmatrix} -5 \\ -1 \end{bmatrix}, Av = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = 2v$$

Gráficamente....A sólo estira (o encoge) el vector v.

Autovalores y autovectores

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, un vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ no nulo puede ser paralelo a $A\mathbf{x}$, lo que significa que existe una constante λ tal que $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$.

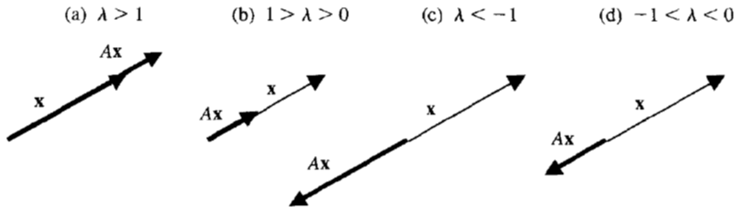
A todos los $\mathbf{x}$ que cumplen esta propiedad se los denomina autovectores de A y λ su autovalor asociado.

Autovalores y autovectores

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, un vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ no nulo puede ser paralelo a $A\mathbf{x}$, lo que significa que existe una constante λ tal que $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$.

A todos los $\mathbf{x}$ que cumplen esta propiedad se los denomina autovectores de A y λ su autovalor asociado.

Representación gráfica:



En muchos casos, la presencia de autovectores-autovalores puede ser utilizada para encontrar una factorización $A = PDP^{-1}$, donde D es una matriz diagonal.

Intuición

Podemos encontrar una base donde la transformación lineal A se comporta como si fuese diagonal.

Observación

No toda matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es diagonalizable.

Teorema

Una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es diagonalizable sí y solo sí A tiene n autovectores linealmente independientes (las columnas de P).

Más teoremas

Teorema Espectral

Si $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es simétrica, entonces existe una base ortonormal de autovectores $\{v_1, \dots, v_n\}$ asociados a $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

Consecuencia: Existe P, y $P^{-1} = P^t$. Luego, $A = PDP^t$.

Teorema

Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Luego, si λ es autovalor de $A^T A$, con autovector v entonces λ es también autovalor de AA^T con autovector Av.

Cálculo de autovalores/autovectores

- Podemos considerar el Método de la Potencia para calcular λ_1 y v_1.
  1. MetodoPotencia(B,x_0,niter)
  2. $v \leftarrow x_0$.
  3. Para $i = 1, \ldots, niter$
  4. $v \leftarrow \frac{Bv}{||Bv||}$
  5. Fin Para
  6. $\lambda \leftarrow v^t Bv$
  7. Devolver λ, v.

Cálculo de autovalores/autovectores

Una vez que tenemos λ_1 y v_1, como seguimos?

Deflación

Sea $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz con autovalores distintos $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$ y una base ortonormal de autovectores. Entonces, la matriz $B - \lambda_1 v_1 v_1^t$ tiene autovalores $0, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ con autovectores asociados $v_1, \ldots, v_n$.

- $(B - \lambda_1 v_1 v_1^t) v_1 = B v_1 - \lambda_1 v_1 (v_1^t v_1) = \lambda_1 v_1 - \lambda_1 v_1 = 0 v_1$.
- $(B - \lambda_1 v_1 v_1^t) v_i = B v_i - \lambda_1 v_1 (v_1^t v_i) = \lambda_i v_i$.

Observación

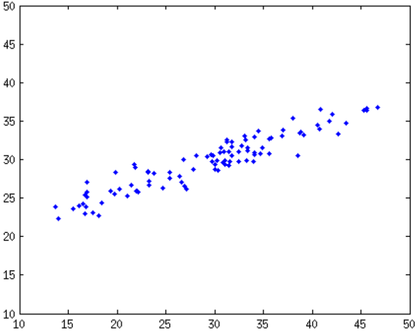
En nuestro caso, no hace falta que todos los autovalores tengan magnitudes distintas.

Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$

Sean $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots, x^{(n)}$ una secuencia de n datos, con $x^{(i)} \in \mathbb{R}^2$.

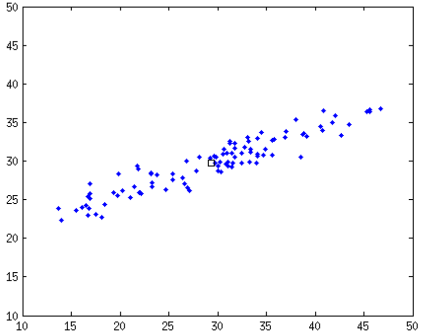
$$X = \begin{bmatrix} {x^{(1)}}^t \\ {x^{(2)}}^t \\ {x^{(3)}}^t \\ {x^{(4)}}^t \\ {x^{(5)}}^t \\ {x^{(6)}}^t \\ \vdots \\ {x^{(n)}}^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26{,}4320 & 27{,}7740 \\ 26{,}8846 & 26{,}5631 \\ 23{,}3309 & 26{,}6983 \\ 30{,}6387 & 31{,}5619 \\ 30{,}5171 & 30{,}8993 \\ 45{,}6364 & 36{,}6035 \\ \vdots & \vdots \\ 16{,}0650 & 24{,}0210 \end{bmatrix}$$



Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$

$$X = \begin{bmatrix} 26{,}4320 & 27{,}7740 \\ 26{,}8846 & 26{,}5631 \\ 23{,}3309 & 26{,}6983 \\ 30{,}6387 & 31{,}5619 \\ 30{,}5171 & 30{,}8993 \\ 45{,}6364 & 36{,}6035 \\ \vdots & \vdots \\ 16{,}0650 & 24{,}0210 \end{bmatrix}$$



Media:
$\mu = \frac{1}{n}(x^{(1)} + \cdots + x^{(n)})$
$\mu = (29{,}3623, 29{,}7148)$

Varianza de una variable x_k: Medida para la dispersión de los datos.
$\sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_k^{(i)} - \mu_k)^2$
$\sigma_{x_1}^2 = 66{,}2134, \ \sigma_{x_2}^2 = 12{,}5491$

Covarianza: Medida de cuánto dos variables varían de forma similar. Variables con mayor covarianza inducen la presencia de cierta dependencia o relación.

$$\sigma_{x_j x_k} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_j^{(i)} - \mu_j)(x_k^{(i)} - \mu_k)$$

Análisis de Componentes Principales

Ejemplo datos en $\mathbb{R}^2$ - Covarianza

Dadas n observaciones de dos variables x_1, x_2, y $v = (1, \ldots, 1)^t$:

$$\sigma_{x_1 x_2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_1^{(i)} - \mu_1)(x_2^{(i)} - \mu_2) = \frac{1}{n-1} (x_2 - \mu_2 v)^t (x_1 - \mu_1 v)$$

Matriz de Covarianza:

$$X = \begin{bmatrix} 26{,}4320 - \mu_1 & 27{,}7740 - \mu_2 \\ 26{,}8846 - \mu_1 & 26{,}5631 - \mu_2 \\ 23{,}3309 - \mu_1 & 26{,}6983 - \mu_2 \\ 30{,}6387 - \mu_1 & 31{,}5619 - \mu_2 \\ 30{,}5171 - \mu_1 & 30{,}8993 - \mu_2 \\ 45{,}6364 - \mu_1 & 36{,}6035 - \mu_2 \\ \vdots & \vdots \\ 16{,}0650 - \mu_1 & 24{,}0210 - \mu_2 \end{bmatrix}$$

$$M_X = \frac{1}{n-1} X^t X = \begin{bmatrix} \sigma_{x_1 x_1} & \sigma_{x_1 x_2} \\ \sigma_{x_1 x_2} & \sigma_{x_2 x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{x_1}^2 & \sigma_{x_1 x_2} \\ \sigma_{x_1 x_2} & \sigma_{x_2}^2 \end{bmatrix}$$

$$M_X = \begin{bmatrix} 66{,}2134 & 27{,}1263 \\ 27{,}1263 & 12{,}5491 \end{bmatrix}$$

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

Objetivo

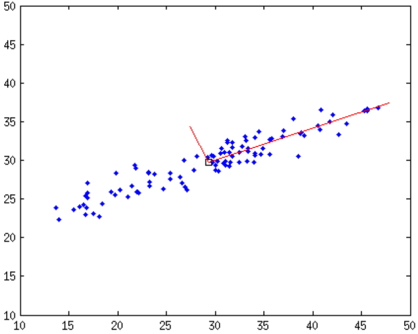
Buscamos una transformación de los datos que disminuya la redundancia (es decir, disminuir la covarianza).
Alternativa y equivalentemente: encontrar direcciones ortogonales que maximicen la varianza de nuestros datos

- Cambio de base: $\hat{X}^t = PX^t$.
- Cómo podemos hacerlo? Diagonalizar la matriz de covarianza. Esta matriz tiene la varianza de cada variable en la diagonal, y la covarianza en las restantes posiciones. Luego, al diagonalizar buscamos variables que tengan covarianza cero entre sí y la mayor varianza posible.
- La matriz de covarianza $M_x = \frac{1}{n-1}X^tX$ es simétrica y semidefinida positiva.
- Si quieren ver una demo, *Pattern Recognition and Machine Learning* de *Christopher Bishop*

¿Cómo expresar mejor nuestros datos?

Volvemos al ejemplo

$$
\begin{aligned}
M_X &= \begin{bmatrix} 66{,}2134 & 27{,}1263 \\ 27{,}1263 & 12{,}5491 \end{bmatrix} \\
&= \underbrace{\begin{bmatrix} 0{,}9228 & -0{,}3852 \\ 0{,}3852 & 0{,}9228 \end{bmatrix}}_{V} \underbrace{\begin{bmatrix} 77{,}5362 & 0 \\ 0 & 1{,}2263 \end{bmatrix}}_{D=M_{\hat{X}}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0{,}9228 & 0{,}3852 \\ -0{,}3852 & 0{,}9228 \end{bmatrix}}_{V^t}
\end{aligned}
$$



Análisis de Componentes Principales

Resumen hasta acá

- Tenemos n muestras de m variables.
- Calculamos el vector μ que contiene la media de cada de una las variables.
- Construimos la matriz $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ donde cada muestra corresponde a una fila de X y tienen media cero (i.e., $X_i := (x^{(i)} - \mu)$).
- Diagonalizamos la matriz de covarianzas $M_X = \frac{X^t X}{n-1}$. La matriz V (ortogonal) contiene los autovectores de M_X.

Propiedades del cambio de base

- Disminuye redundancias.
- El cambio de base $\hat{X}^t = PX^t = V^t X^t$ asigna a cada muestra un nuevo *nombre* mediante un cambio de coordenadas.
- Las columnas de V (autovectores de M_X) son las componentes principales de los datos.
- En caso de m grande, es posible tomar sólo un subconjunto de las componentes principales para estudiar (i.e., aquellas que capturen mayor proporción de la varianza de los datos).