ANÁLISIS DE DATOS MASIVOS

ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

Blanca Vázquez 23 de enero de 2025

RECORDANDO LA MALDICIÓN DE LA DIMENSIONALIDAD

 Objetos cada vez más dispersos conforme aumenta el número de dimensiones

LA HIPÓTESIS DE LA VARIEDAD

 Ejemplos pueden vivir en una variedad de muchas menores dimensiones que el espacio original

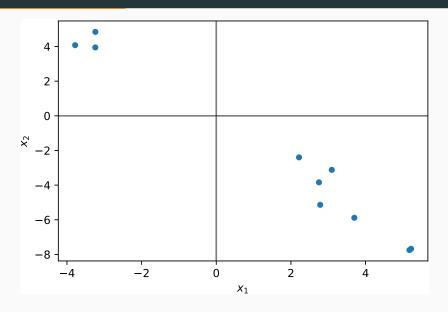


Imagen tomada de Li and Jain, 2005

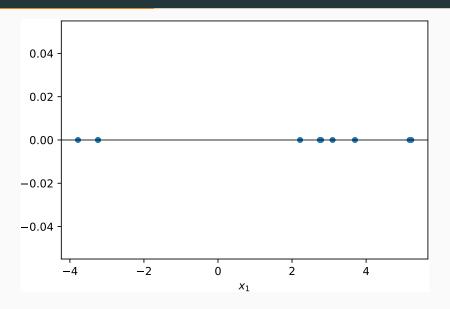
ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES (PCA)

- · Proyección ortogonal de un conjunto de vectores
- · Genera una nueva vista
- Aplicaciones
 - Visualización
 - · Extracción de características
 - · Reducción de dimensionalidad
 - · Compresión

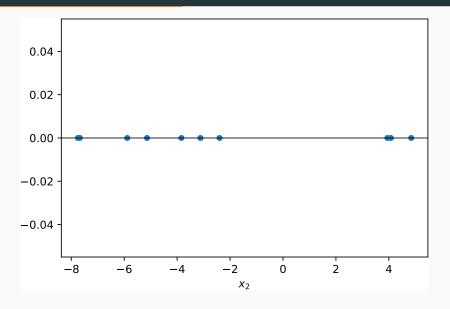
Intuición: datos en 2D



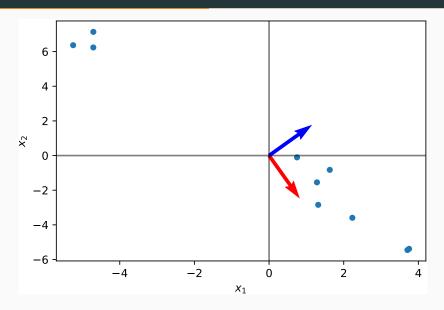
INTUICIÓN: DATOS VISTOS DESDE EL EJE X



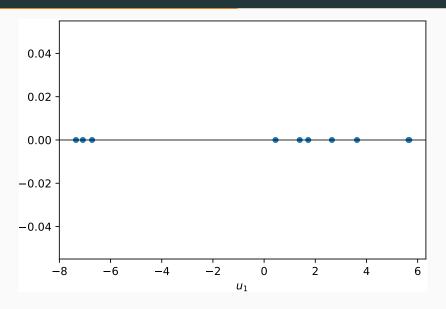
INTUICIÓN: DATOS VISTOS DESDE EL EJE y



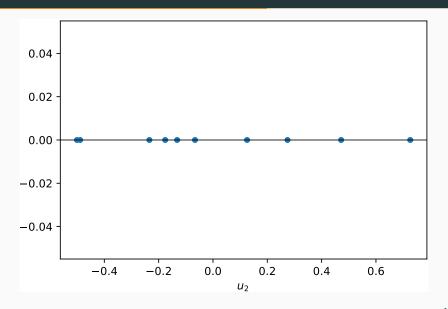
INTUICIÓN: NUEVOS EJES u_1 Y u_2



INTUICIÓN: DATOS PROYECTADOS SOBRE EL EJE U1



Intuición: datos proyectados sobre el eje u_2



PCA: FORMULACIÓN DE MÁXIMA VARIANZA

Dado un conjunto de vectores X = {x⁽¹⁾,...,x⁽ⁿ⁾} de d dimensiones, el primer componente principal es el vector u₁ que maximice la varianza de los datos proyectados, donde u₁ es un vector de d dimensiones

 La proyección de un vector sobre el componente principal está dado por

$$\hat{x}^{(i)} = u_1^\top x^{(i)}$$

 La proyección de un vector sobre el componente principal está dado por

$$\hat{\mathbf{x}}^{(i)} = \mathbf{u}_1^\top \mathbf{x}^{(i)}$$

· La media de los datos proyectados es $\mathbf{u}_1^{\top} \overline{\mathbf{x}}$, donde

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}^{(i)}$$

 La proyección de un vector sobre el componente principal está dado por

$$\hat{x}^{(i)} = u_1^\top x^{(i)}$$

· La media de los datos proyectados es $\mathbf{u}_1^{\top} \overline{\mathbf{x}}$, donde

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}^{(i)}$$

· La varianza es $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \left[\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{u}_1^{\top}\overline{\mathbf{x}}\right] = \mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1$, donde

$$S = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{x}^{(i)} - \overline{\mathbf{x}}) (\mathbf{x}^{(i)} - \overline{\mathbf{x}})^{\top}$$

• Queremos encontrar el vector \mathbf{u}_1 que maximice la varianza de los datos proyectados $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1$, con la restricción que $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1=1$

- Queremos encontrar el vector \mathbf{u}_1 que maximice la varianza de los datos proyectados $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1$, con la restricción que $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1=1$
- Podemos formular esta restricción usando multiplicadores de Lagrange: $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1 + \lambda_1(1-\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1)$

- Queremos encontrar el vector \mathbf{u}_1 que maximice la varianza de los datos proyectados $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1$, con la restricción que $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1=1$
- Podemos formular esta restricción usando multiplicadores de Lagrange: $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1 + \lambda_1(1-\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1)$
- · Derivando e igualando a cero, tenemos

$$Su_1 = \lambda_1 u_1$$

- Queremos encontrar el vector \mathbf{u}_1 que maximice la varianza de los datos proyectados $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1$, con la restricción que $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1=1$
- Podemos formular esta restricción usando multiplicadores de Lagrange: $\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{S}\mathbf{u}_1 + \lambda_1(1-\mathbf{u}_1^{\top}\mathbf{u}_1)$
- · Derivando e igualando a cero, tenemos

$$Su_1=\lambda_1u_1$$

• Esto es, \mathbf{u}_1 es un vector propio de \mathbf{S} , donde $\lambda_1 = \mathbf{u}_1^{\top} \mathbf{S} \mathbf{u}_1$ es su valor propio que se corresponde con la varianza de los datos proyectados

 El siguiente componente principal es el vector propio que maximice la varianza de los datos proyectados entre el conjunto de vectores ortogonales a los que ya han sido elegidos.

Este proceso se realiza de forma incremental hasta obtener los *K* componentes principales.

• El conjunto de *K* componentes principales forman una base ortonormal de funciones.

PROYECCIÓN Y RECONSTRUCCIÓN CON PCA

• Para proyector un vector $\mathbf{x}^{(i)}$ sobre los componentes principales

$$z^{(i)} = U^{\top} \left[x^{(i)} - \overline{x} \right]$$

donde $U = [u_1, u_2, ..., u_K]$ es una matriz cuyas columnas se corresponden con los K componentes principales.

· La reconstrucción está dada por

$$\hat{x}^{(i)} = Uz^{(i)} + \overline{x}$$

PCA POR VECTORES Y VALORES PROPIOS

- Busca subespacio de *K* dimensiones que maximiza varianza (o minimiza error) de los ejemplos
 - Definido por eigenvectores $\mathbf{u}_1,\dots,\mathbf{u}_K$ con eigenvalores más grandes $\lambda_1,\dots,\lambda_K$ de la matriz de covarianza

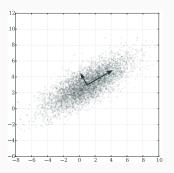


Figura tomada de Wikipedia (Principal Component Analysis)

PCA APLICADO A IMÁGENES DE ROSTROS

- Componentes principales se toman como base (eigenfaces)
- Nuevos rostros se proyectan en subespacio encontrado para ser comparados

