Departamento de Ciência da COMPUTAÇÃO

UDESC Joinville

PCA
(*Principal Component Analysis*)

André Tavares da Silva

andre.silva@udesc.br

Adaptado dos slides de David Menotti (UFOP)

Objetivos

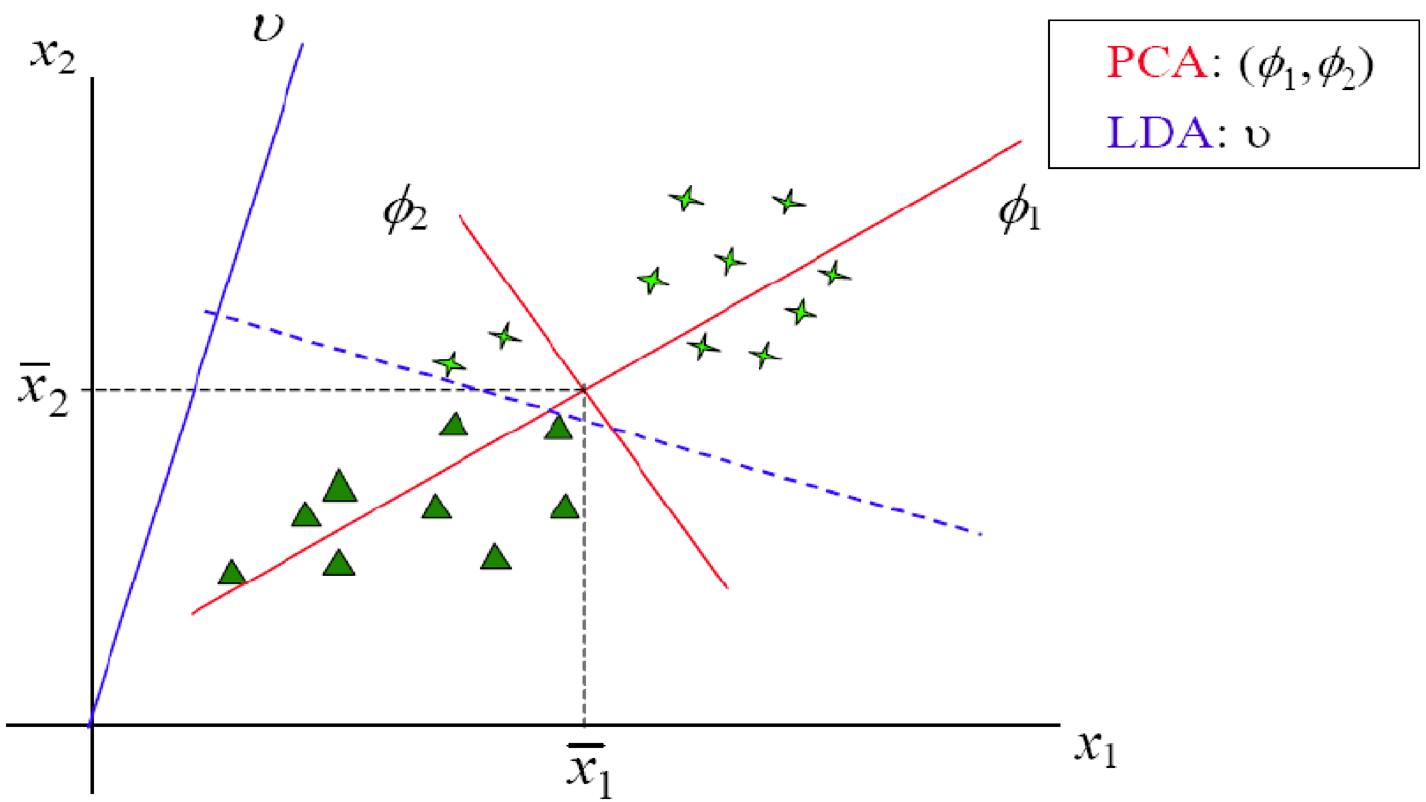
- Introduzir os conceitos de PCA
- Revisão dos conceitos básicos de estatística e álgebra linear.
- Definições e interpretação geométrica
- Como calcular (tutorial)
- Aplicações no reconhecimento de padrões

Departamento de Ciência da COMPUTAÇÃO

UDESC Joinville

PCA

- Diferença entre PCA e LDA quando aplicados sobre os mesmos dados



Departamento de Ciência da COMPUTAÇÃO

UDESC Joinville

Análise de Componentes Principais (PCA)

- Dado um conjunto D com *n* instâncias e *p* atributos ($x_1, x_2, \ldots, x_p$), uma transformação linear (ex.: rotação) para um novo conjunto de atributos $z_1, z_2, \ldots, z_p$ pode ser calculada como:

$$
\begin{aligned}
z_1 &= a_{11} x_1 + a_{21} x_2 + \ldots + a_{p1} x_p \\
z_2 &= a_{12} x_1 + a_{22} x_2 + \ldots + a_{p2} x_p \\
&\ldots \\
z_p &= a_{1p} x_1 + a_{2p} x_2 + \ldots + a_{pp} x_p
\end{aligned}
$$

- Componentes Principais (PCs) são tipos específicos de combinações lineares que são escolhidas de tal modo que z_p (PCs) tenham as seguintes características

PCA: Características

- As *p* componentes principais (PC) são não-correlacionadas (independentes)
- As PCs são ordenadas de acordo com quantidade da variância dos dados originais que elas contêm (ordem decrescente)
  - A primeira PC representa a maior variabilidade do conjunto de dados original
  - A segunda PC define a próxima maior e assim por diante
  - Em geral, apenas algumas das primeiras PCs são responsáveis pela maior parte da variabilidade do conjunto de dados
  - O restante das PCs tem uma contribuição insignificante
- PCA é usada em Aprendizado de Máquina principalmente para a redução de dimensionalidade

PCA: Cálculo

- PCA pode ser reduzida ao problema de encontrar os autovalores e autovetores da matriz de covariância (ou correlação) do conjunto de dados
- A proporção da variância do conjunto de dados originais explicada pela *i*-ésima PC é igual ao *i*-ésimo auto-valor divido pela soma de todos os *p* auto-valores
- Ou seja, as PCs são ordenadas decrescentemente de acordo com os autovalores
- Quando os valores dos diferentes atributos estão em diferentes escalas, é preferível usar a matriz de correlação em lugar da matriz de covariância

Estatística

- Variância
  - Variância de uma variável aleatória é uma medida de dispersão estatística, indicando quão longe em geral os seus valores se encontram do valor esperado.

$$s^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 ,$$

  - Desvio padrão é a raiz da variância

Estatística

- Covariância
  - Variância é uma medida unidimensional, calculada de maneira independente pois não leva em consideração as outras dimensões.
  - Covariância por sua vez, é uma medida bidimensional. Verifica a dispersão, mas levando em consideração duas variáveis aleatórias.

$$cov(X,Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{(n-1)}$$

Estatística

- Matriz de covariância
  - Para 3 variáveis aleatórias, x, y e z, o cálculo de todas as covariâncias (x-y, x-z e y-z) pode ser acomodada em uma matriz, a qual denomina-se matriz de covariância.

$$C = \begin{pmatrix} cov(x,x) & cov(x,y) & cov(x,z) \\ cov(y,x) & cov(y,y) & cov(y,z) \\ cov(z,x) & cov(z,y) & cov(z,z) \end{pmatrix}$$

Cov(x,y) = cov(y,x)

Cov(z,z) = var(z)

Álgebra

- Autovetores
  - Como sabe-se duas matrizes podem ser multiplicadas se elas possuem tamanhos compatíveis. Autovetores são casos especiais neste contexto.

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 8 \end{pmatrix} = 4 \times \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} \longrightarrow$$

Múltiplo do vetor resultante

Autovetores

- Nesse caso (3,2) representa um vetor que aponta da origem (0,0) para o ponto (3,2).
- A matriz quadrada, pode ser vista como uma matriz de transformação.
- Se esta matriz for multiplicada por outro vetor, a resposta será outro vetor transformado da sua posição original.
- É da natureza desta transformação que surgem os autovetores.

Autovetores

- Propriedades
  - Podem ser achados somente em matrizes quadradas.
  - Para uma dada *n* x *n* matriz, existem *n* autovetores.
  - Nem todas as matrizes possuem autovetores.
  - Se o vetor for multiplicado por uma constante, ainda obteremos o mesmo resultado

$$2 \times \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 4 \end{pmatrix}$$

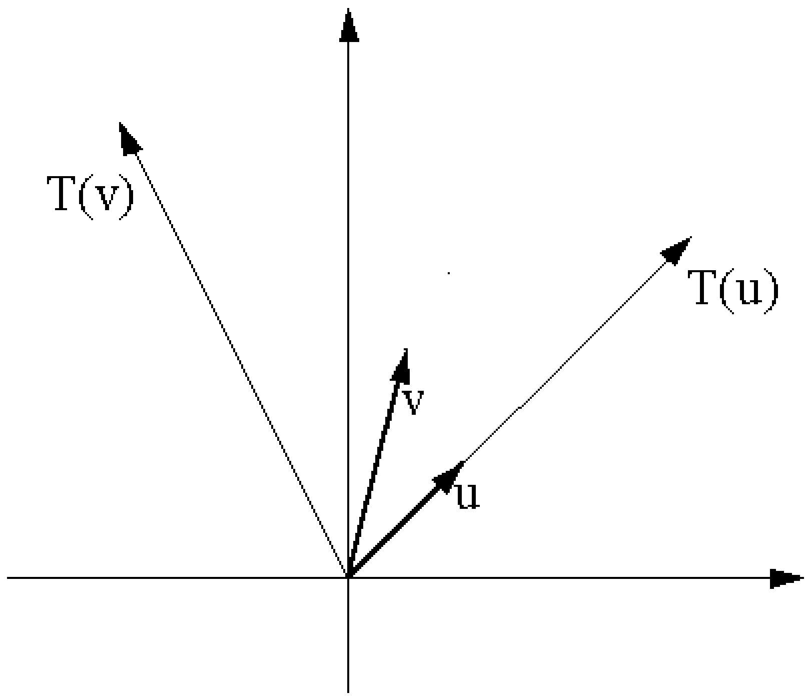
$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 6 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24 \\ 16 \end{pmatrix} = 4 \times \begin{pmatrix} 6 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Apenas fazemos o vetor mais longo, mas não mudamos a direção.

Autovetores/Autovalores

- Todos os autovetores são ortogonais (perpendiculares), ou seja os dados podem ser expressos em termos destes vetores.
- O valor pelo qual o vetor é multiplicado é conhecido como autovalor
  - Um autovetor sempre possui um autovalor associado.

Interpretação Geométrica



u é autovetor de T
v não é autovetor de T

Definições

- Seja A uma matriz de ordem nxn
- O número λ é o **autovalor** (*eigenvalue*) de A se existe um vetor não-zero $\boldsymbol{v}$ tal que

$$A\,v = \lambda\,v$$

- Neste caso, o vetor **v** é chamado de **autovetor** (*eigenvector*) de A correspondente à λ.

Calculando Autovalores e Autovetores

- Pode-se reescrever a condição:

$$A\,\boldsymbol{v} = \boldsymbol{\lambda}\,\boldsymbol{v}$$

como

$$(\,A - \boldsymbol{\lambda}\,I\,)\,\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

onde I é a matriz identidade de ordem nxn.

- Para que um vetor não-zero $\boldsymbol{v}$ satisfaça a equação, $(\,A - \boldsymbol{\lambda}\,I\,)$ deve ser **não** inversível.

Calculando Autovalores e Autovetores

- Caso contrário, se ($A - \lambda I$) tiver uma inversa, então

$$(A - \lambda I)^{-1}(A - \lambda I)\,v = (A - \lambda I)^{-1}\,\mathbf{0}$$

$$v = \mathbf{0}$$

- Mas, procura-se por um vetor **v** não-zero.

Calculando Autovalores e Autovetores

- Voltando, isto é, o determinante de $(A - \lambda I)$ deve ser igual à 0.
- Chama-se

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

de **polinômio característico** de A.

- Os autovalores de A são as raízes do polinômio característico de A.

Calculando Autovalores e Autovetores

- Para se calcular o i-ésimo autovetor $\boldsymbol{v}_{\mathbf{i}} = [\, \boldsymbol{v}_{\mathbf{1}} \,;\, \boldsymbol{v}_{\mathbf{2}} \,;\, \ldots \,;\, \boldsymbol{v}_{\mathbf{n}} \,]$

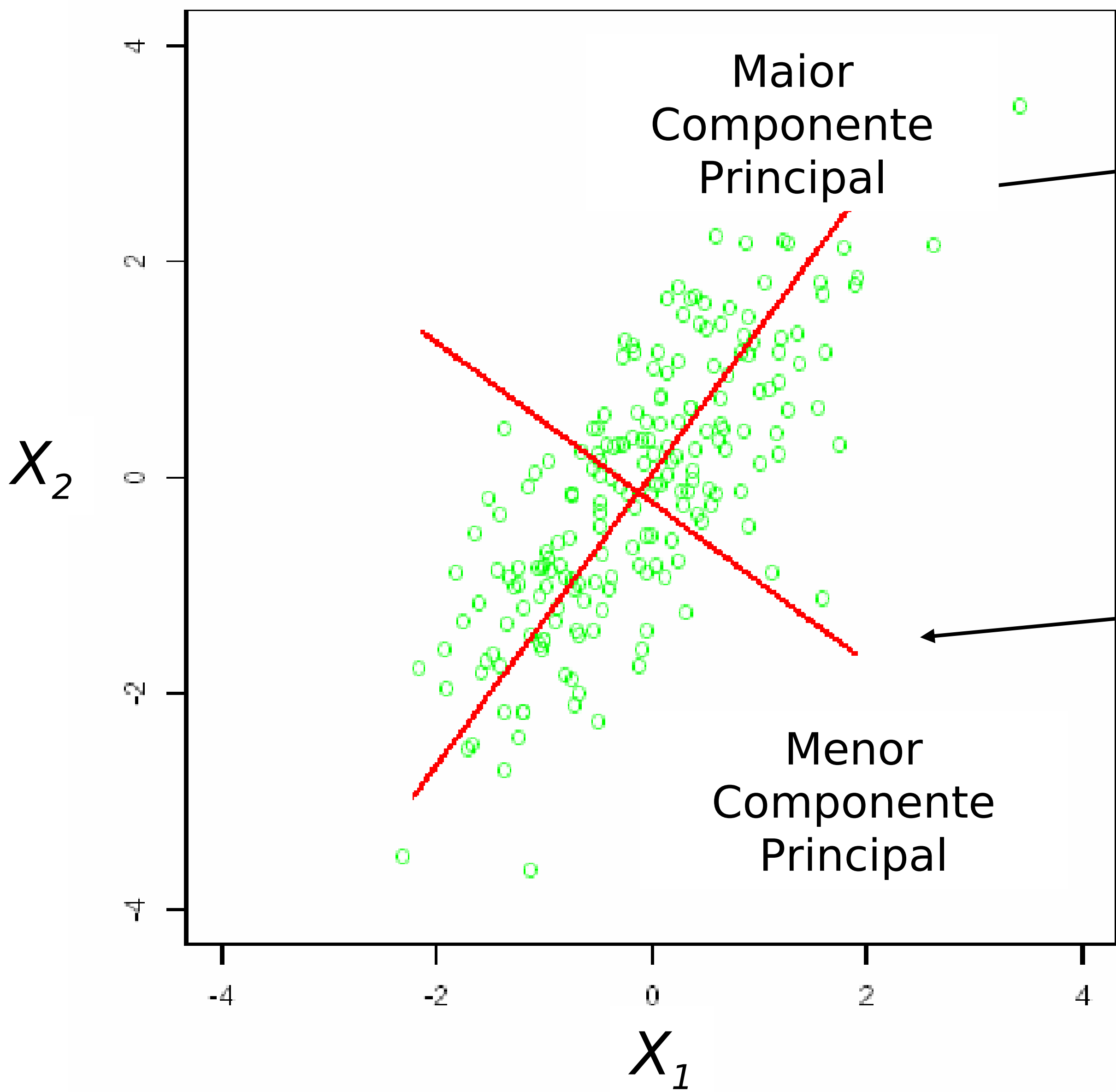
correspondente à um autovalor λ_i, basta resolver o sistema linear de equações dado por

$$(A - \lambda I)\, v = 0$$

Análise dos Componentes Principais (PCA)

- Uma maneira de identificar padrões em dados, colocando em evidência suas similaridades e diferenças.
- Ferramenta importante para altas dimensões, onde não podemos fazer uma análise visual.
- Uma vez encontrados esses padrões, podemos comprimir os dados sem grande perda de qualidade.
- Escolha de características (representação)

PCA



maximiza a variância

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_2}$$

minimiza a variância

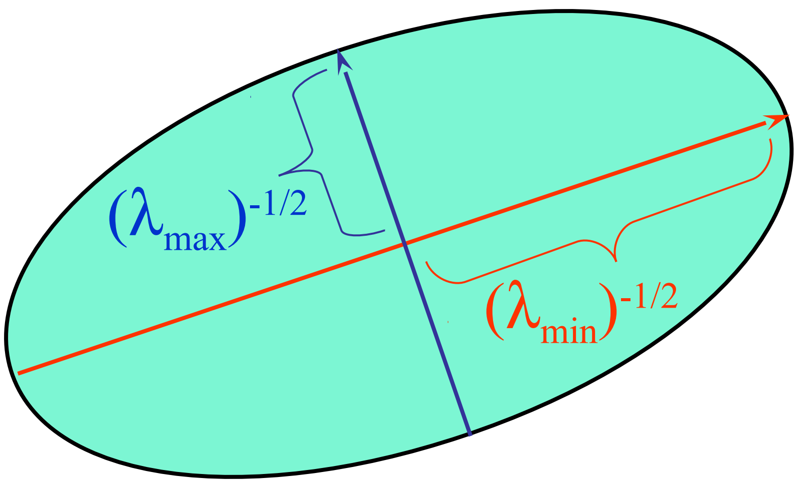
$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1+\lambda_2}$$

MarcoMachado

Interpretação geométrica

$$J = \mathbf{x}^t \mathbf{S} \mathbf{x} \geq 0, \qquad \mathbf{S}\ simétrica$$

$$J = \begin{bmatrix} u & v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u' & v' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u' \\ v' \end{bmatrix} = const$$



λ_1, λ_2 – autovalores de $\mathbf{S}$

$$\lambda_1 (u')^2 + \lambda_2 (v')^2 = const$$

PCA

- Variância total = soma das variâncias

- Variância total = traço de ***S***

$$\mathrm{tr}(\mathbf{S}) = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^{\,2} = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i$$

- Eixos principais também representam a variância total do conjunto de dados.
  - Primeiro eixo: λ_1/traço(**S**)
  - Segundo eixo: λ_2/traço(**S**)

PCA Tutorial

1) Escolha um conjunto de dados.

2) Centralize os dados, subtraindo-os da média.

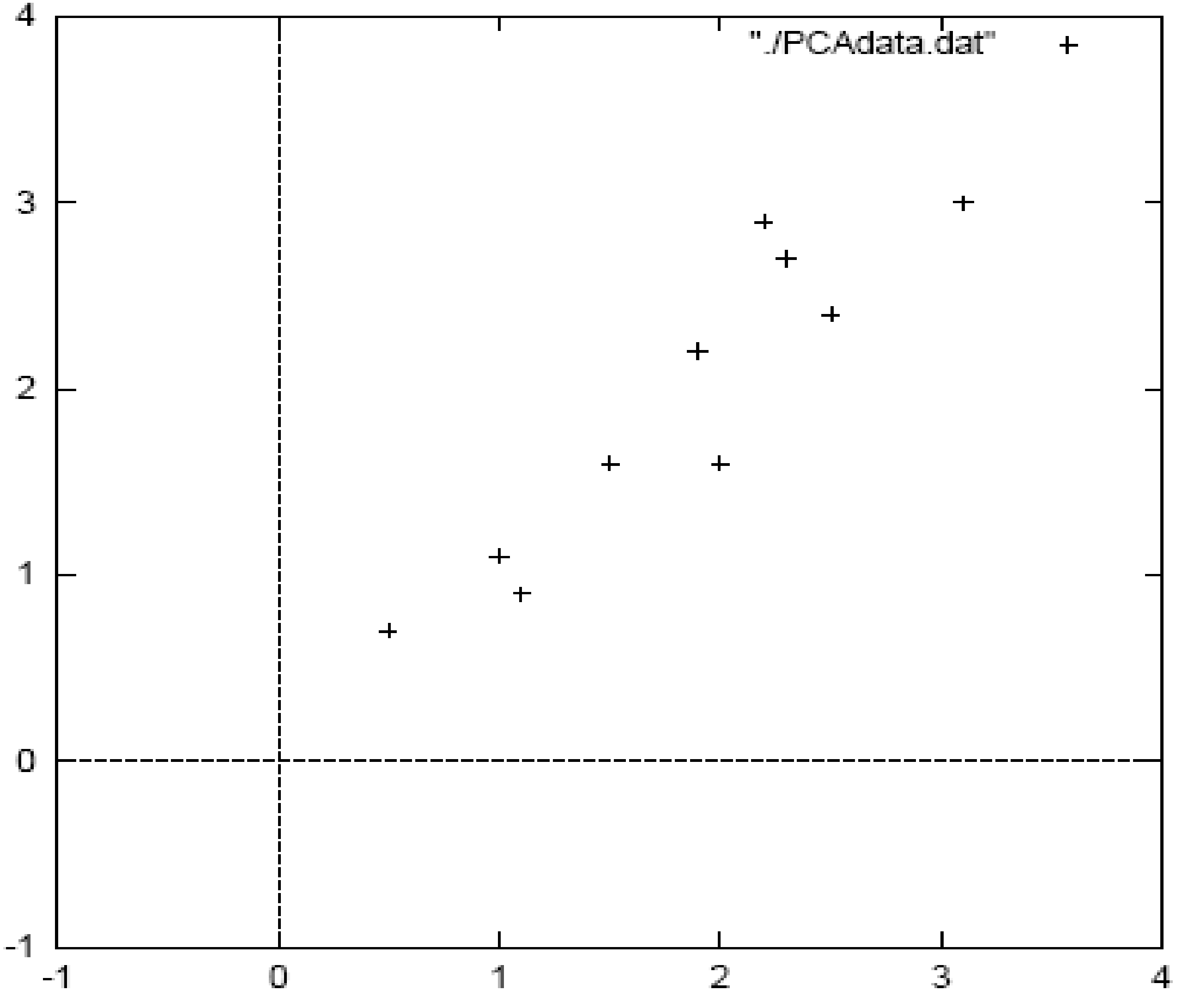
Dados

x	y
2.5	2.4
0.5	0.7
2.2	2.9
1.9	2.2
3.1	3.0
2.3	2.7
2	1.6
1	1.1
1.5	1.6
1.1	0.9

Dados Centrados

x	y
.69	.49
-1.31	-1.21
.39	.99
.09	.29
1.29	1.09
.49	.79
.19	-.31
-.81	-.81
-.31	-.31
-.71	-1.01

PCA Tutorial



Departamento de Ciência da COMPUTAÇÃO

UDESC Joinville

PCA Tutorial

3) Calcule a matriz de covariância para os dados normalizados. Uma vez que os dados possuem duas dimensões, teremos uma matriz 2x2

$$cov = \begin{pmatrix} .616555556 & .615444444 \\ .615444444 & .716555556 \end{pmatrix}$$

PCA Tutorial

4) Encontre os autovetores e autovalores para a matriz de covariância.

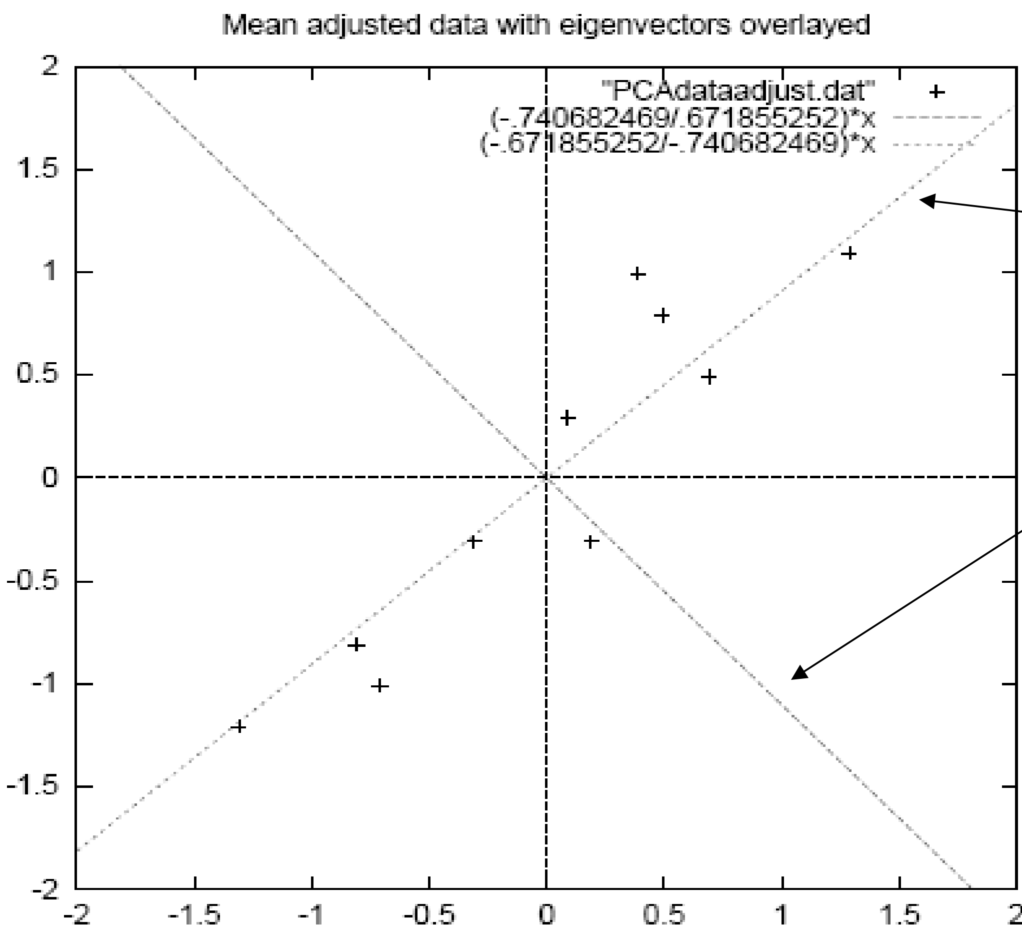
– Uma vez que a matriz de covariância é quadrada podemos encontrar os autovetores e autovalores.

$$eigenvalues = \begin{pmatrix} .0490833989 \\ 1.28402771 \end{pmatrix}$$

$$eigenvectors = \begin{pmatrix} -.735178656 & -.677873399 \\ .677873399 & -.735178656 \end{pmatrix}$$

O que esses valores significam ??

PCA Tutorial



$$\begin{pmatrix} -.735178656 & -.677873399 \\ .677873399 & -.735178656 \end{pmatrix}$$

PCA Tutorial

5) Escolhendo os componentes que vão formar o vetor

- Como vimos, os autovalores são bastante diferentes.
- Isso permite ordenar os autovetores por ordem de importância.
- Se quisermos eliminar um componente, devemos então eliminar os que tem menos importância.

$$FeatureVector = (eig_1\ eig_2\ eig_3\ ....\ eig_n)$$

PCA Tutorial

- No nosso exemplo temos duas escolhas
  - Manter os dois.
  - Eliminar um autovetor, diminuindo assim a dimensionalidade dos dados.
    - Maldição da dimensionalidade: quanto maior a dimensionalidade do seu vetor, mais dados serão necessários para a aprendizagem do modelo.

PCA Tutorial

5) Construindo novos dados.

- Uma vez escolhidos os componentes (autovetores), nós simplesmente multiplicamos os dados pelo autovetor(es) escolhidos.
- O que temos?
  - Dados transformados de maneira que expressam os padrões entre eles.
  - Os PCs (*Principal Components*) são combinações lineares de todas as características, produzindo assim novas características não correlacionadas.

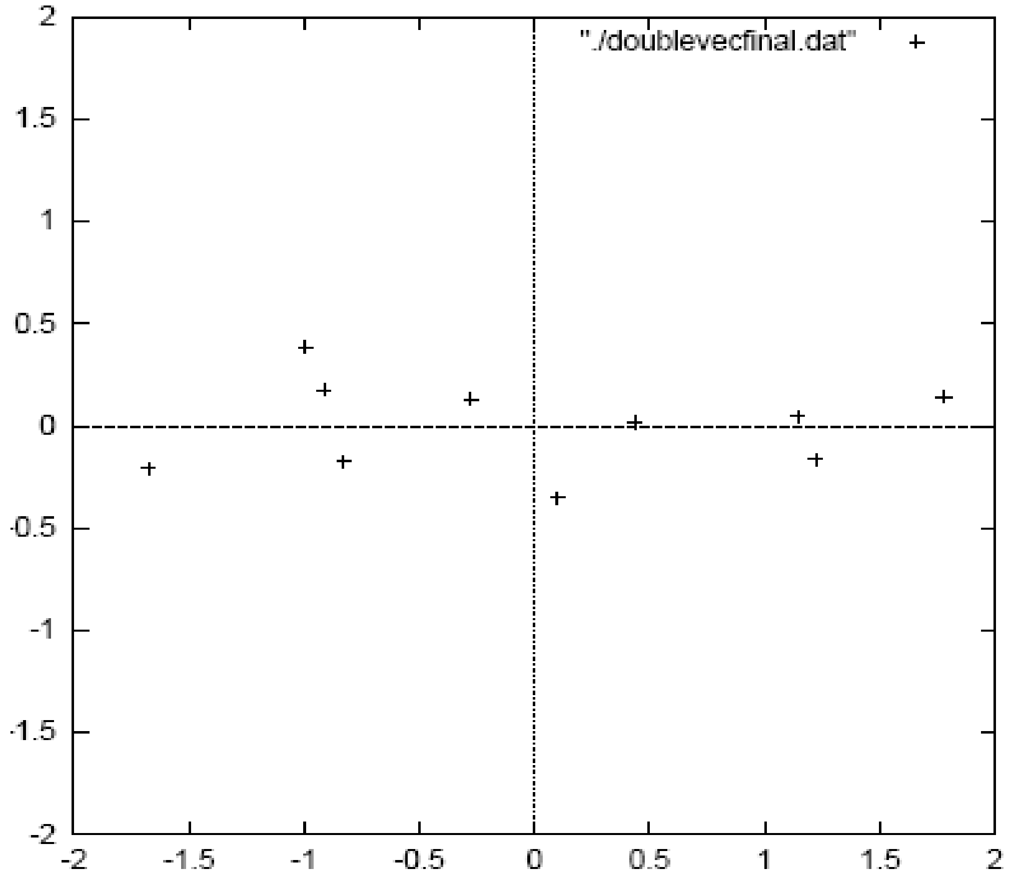
Departamento de Ciência da COMPUTAÇÃO

UDESC Joinville

PCA Tutorial

Dados transformados usando 2 autovetores

x	y
-.827970186	-.175115307
1.77758033	.142857227
-.992197494	.384374989
-.274210416	.130417207
-1.67580142	-.209498461
-.912949103	.175282444
.0991094375	-.349824698
1.14457216	.0464172582
.438046137	.0177646297
1.22382056	-.162675287



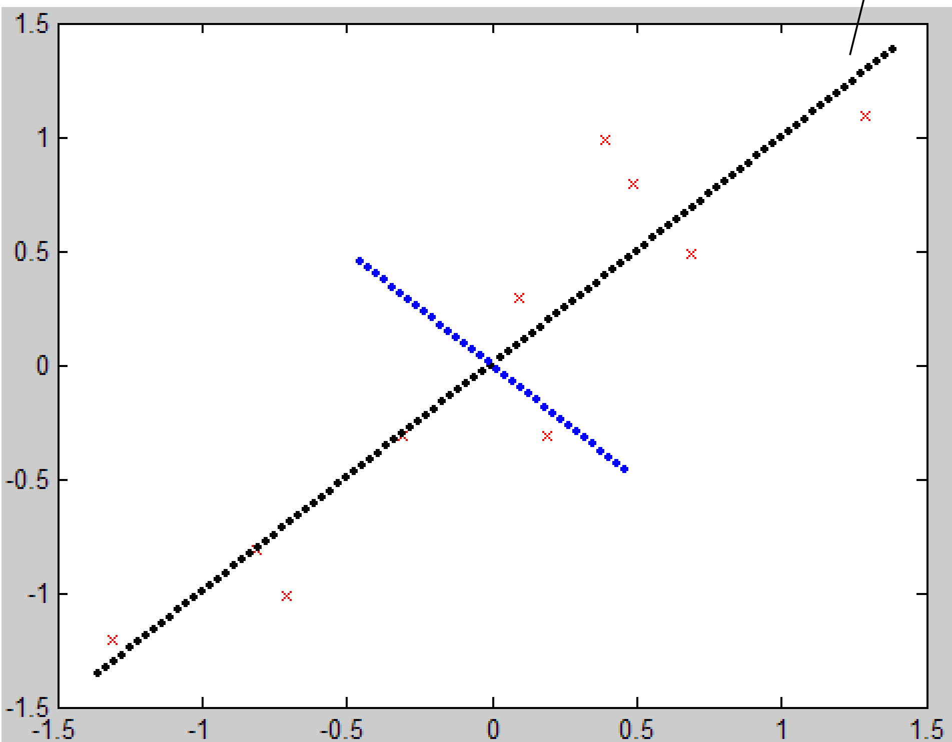
Departamento de Ciência da COMPUTAÇÃO

UDESC Joinville

PCA Tutorial

- Exemplo

$$y = \frac{-W_1 \times x - b}{W_2}$$



AUTOVETORES

-0.6779	-0.7352
-0.7352	0.6779

AUTOVALORES

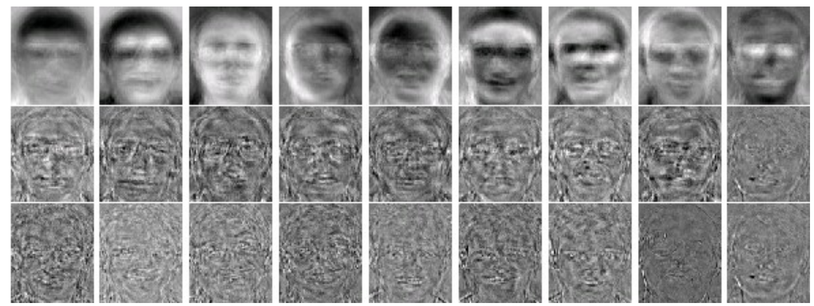
1.2840

0.0491

Utilização do PCA

- Objetivo: reduzir a dimensionalidade do espaço de entrada R^n, mantendo tanta informação quanto possível, em um novo espaço R^n.
  - Adquirir os dados: Número de vetores...
  - Calcular a Matriz de Covariância/Correlação
  - Calcular os Autovalores e Autovetores
  - Escolher os autovetores: Critério da informação...
  - Mapear os dados para o novo espaço

Exemplo: Reconhecimento de Face



EigenFaces

Próxima aula!

Análise de Componentes Principais

- Principais Limitações

  – Assume apenas relações lineares entre os atributos

  – A interpretação dos resultados em termos dos atributos originais pode ficar mais difícil