Método de la Potencia y PCA

Métodos Numéricos

12 de mayo de 2023

Repaso: 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.

Repaso: 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.

Veamos un ejemplo más gráfico

Repaso: Autovalores y Autovectores

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.

Repaso: Autovalores y Autovectores

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.

Repaso: Autovalores y Autovectores

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 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ asociados a $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$.

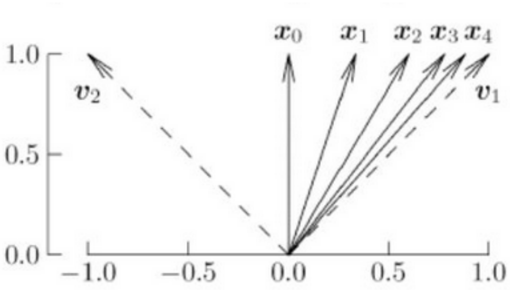
Consecuencia: Existe P, y $P^{-1} = P^t$. Luego, $A = PDP^t$.

Cálculo de autovalores/autovectores

- La matriz de covarianza $M_x = \frac{1}{n-1} X^t X$ es simétrica y semidefinida positiva.
- Vamos a querer diagonalizar M_X para obtener la transformación asociada a PCA. Para eso también tenemos que calcular sus autovectores.

Método de la Potencia

Dibujito



Método de la Potencia

Algoritmo

Podemos considerar el <u>Método de la Potencia</u> para calcular λ_1 y v_1.

1. MetodoPotencia(B,x_0,niter)
2. $\quad v \leftarrow x_0$.
3. $\quad$ Para $i = 1, \ldots, niter$
4. $\qquad v \leftarrow \frac{Bv}{||Bv||}$
5. $\quad$ Fin Para
6. $\quad \lambda \leftarrow \frac{v^t Bv}{v^t v}$
7. $\quad$ Devolver λ, v.

Método de la Potencia

Algoritmo

Podemos considerar el Método de la Potencia para calcular λ_1 y v_1.

1. MetodoPotencia(B,x_0,niter)
2. $\quad v \leftarrow x_0$.
3. $\quad$ Para $i = 1, \ldots, niter$
4. $\qquad v \leftarrow \frac{Bv}{||Bv||}$
5. $\quad$ Fin Para
6. $\quad \lambda \leftarrow \frac{v^t Bv}{v^t v}$
7. $\quad$ Devolver λ, v.

Pará.

Podemos considerar el <u>Método de la Potencia</u> 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. $\lambda \leftarrow \frac{v^t Bv}{v^t v}$
7. Devolver λ, v.

Pará. ¿Qué hipótesis necesitamos?

Cálculo de autovalores/autovectores

Una vez que tenemos λ_1 y v_1, como seguimos?

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 $v_1, \ldots, v_n$.

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 $v_1, \ldots, v_n$.

- $(B - \lambda_1 v_1 v_1^t)v_1 = Bv_1 - \lambda_1 v_1(v_1^t v_1) = \lambda_1 v_1 - \lambda_1 v_1 = 0v_1$.
- $(B - \lambda_1 v_1 v_1^t)v_i = Bv_i - \lambda_1 v_1(v_1^t v_i) = \lambda_i v_i$.

Observación

En el caso de PCA, no hace falta que todos los autovalores tengan magnitudes distintas.

En el contexto de nuestro problema tenemos que:

- Las instancias están en un espacio de dimensión alta. Problemas?

En el contexto de nuestro problema tenemos que:

- Las instancias están en un espacio de dimensión alta. Problemas?
- Tiene sentido pensar que el hecho de que estén en ese espacio es circunstancial. Idealmente debería existir otro, de menor dimensión, donde las instancias queden "mejor expresadas".

Análisis de Componentes Principales

Intuición

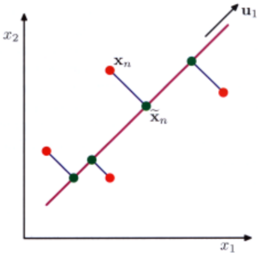
- Para ir al nuevo espacio (S) vamos a aplicarles una transformación de cambio de base ortogonal.

- Para ir al nuevo espacio (S) vamos a aplicarles una transformación de cambio de base ortogonal.
- Nos va a interesar reducir la dimensionalidad (se puede ver como comprimir, aproximar, depende el contexto).
- Por lo tanto, nos va a interesar proyectar cada instancia a un subespacio de S

- Para ir al nuevo espacio (S) vamos a aplicarles una transformación de cambio de base ortogonal.
- Nos va a interesar reducir la dimensionalidad (se puede ver como comprimir, aproximar, depende el contexto).
- Por lo tanto, nos va a interesar proyectar cada instancia a un subespacio de S
- Vamos a querer que elegir el subespacio tomando direcciones que maximicen la varianza de las instancias trasnformadas y minimicen la covarianza (redundancia entre las direcciones).

Análisis de Componentes Principales

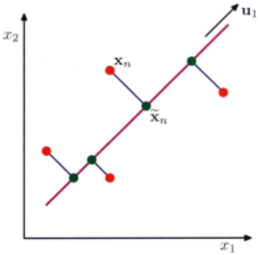
Intuición



En concreto, ¿Que buscamos en el nuevo subespacio de menor dimensión?

Análisis de Componentes Principales

Intuición



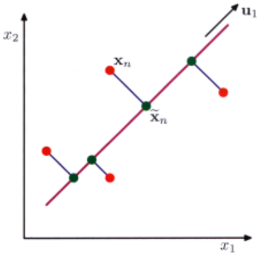
En concreto, ¿Que buscamos en el nuevo subespacio de menor dimensión?

Dualidad

- Encontrar direcciones tal que se maximice la varianza de los datos proyectados (puntos verdes en la diagonal).

Análisis de Componentes Principales

Intuición



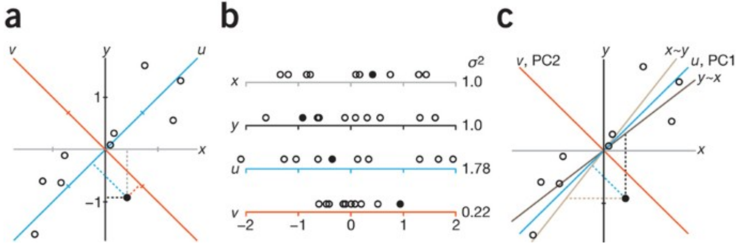
En concreto, ¿Que buscamos en el nuevo subespacio de menor dimensión?

Dualidad

- Encontrar direcciones tal que se maximice la varianza de los datos proyectados (puntos verdes en la diagonal).
- encontrar direcciones tal que se minimice la suma de los cuadrados de los errores de las proyecciones (segmentos perpendiculares a la diagonal).

Análisis de Componentes Principales

Dibujito

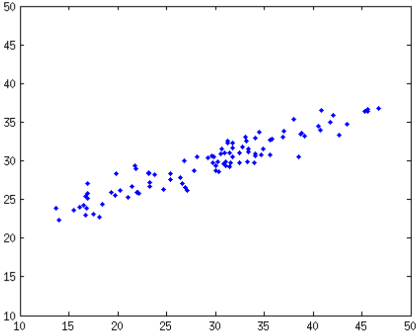


Análisis de Componentes Principales

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

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

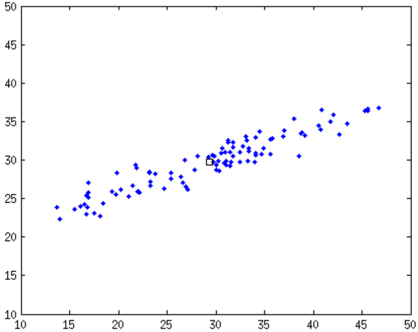
$$X = \begin{bmatrix} {x^{(1)}}^t \\ {x^{(2)}}^t \\ {x^{(3)}}^t \\ {x^{(4)}}^t \\ {x^{(5)}}^t \\ {x^{(6)}}^t \\ \vdots \\ {x^{(n)}}^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26{,}4320 & 27{,}7740 \\ 26{,}8846 & 26{,}5631 \\ 23{,}3309 & 26{,}6983 \\ 30{,}6387 & 31{,}5619 \\ 30{,}5171 & 30{,}8993 \\ 45{,}6364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



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.
$\sigma^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_k^{(i)} - \mu_k)^2$
$\sigma_{x_1}^2 = 66{,}2134, \ \sigma_{x_2}^2 = 12{,}5491$

Análisis de Componentes Principales

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

<u>Covarianza:</u> 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 $v = (1, \dots, 1)^t$:

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

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

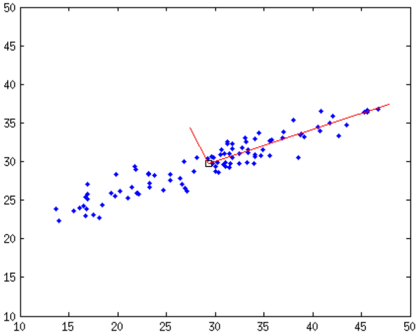
Buscamos una transformación de los datos que disminuya la redundancia (es decir, disminuir la covarianza).
Alternativa y equivalentemente: encontrar direcciones ortogonales que maximicen la varianza de nuestros datos

- 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.
- 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).

Análisis de Componentes Principales

Caso de estudio

Veamos que ocurre al aplicar PCA a un dataset de dígitos manuscritos y cómo eso puede servirnos según el tipo de problema a resolver.

Otros ejemplos **acá**