Análisis de componentes principales

a.k.a.: PCA – Principal components analysis

Outline

- Motivación
- Derivación
- Ejemplos

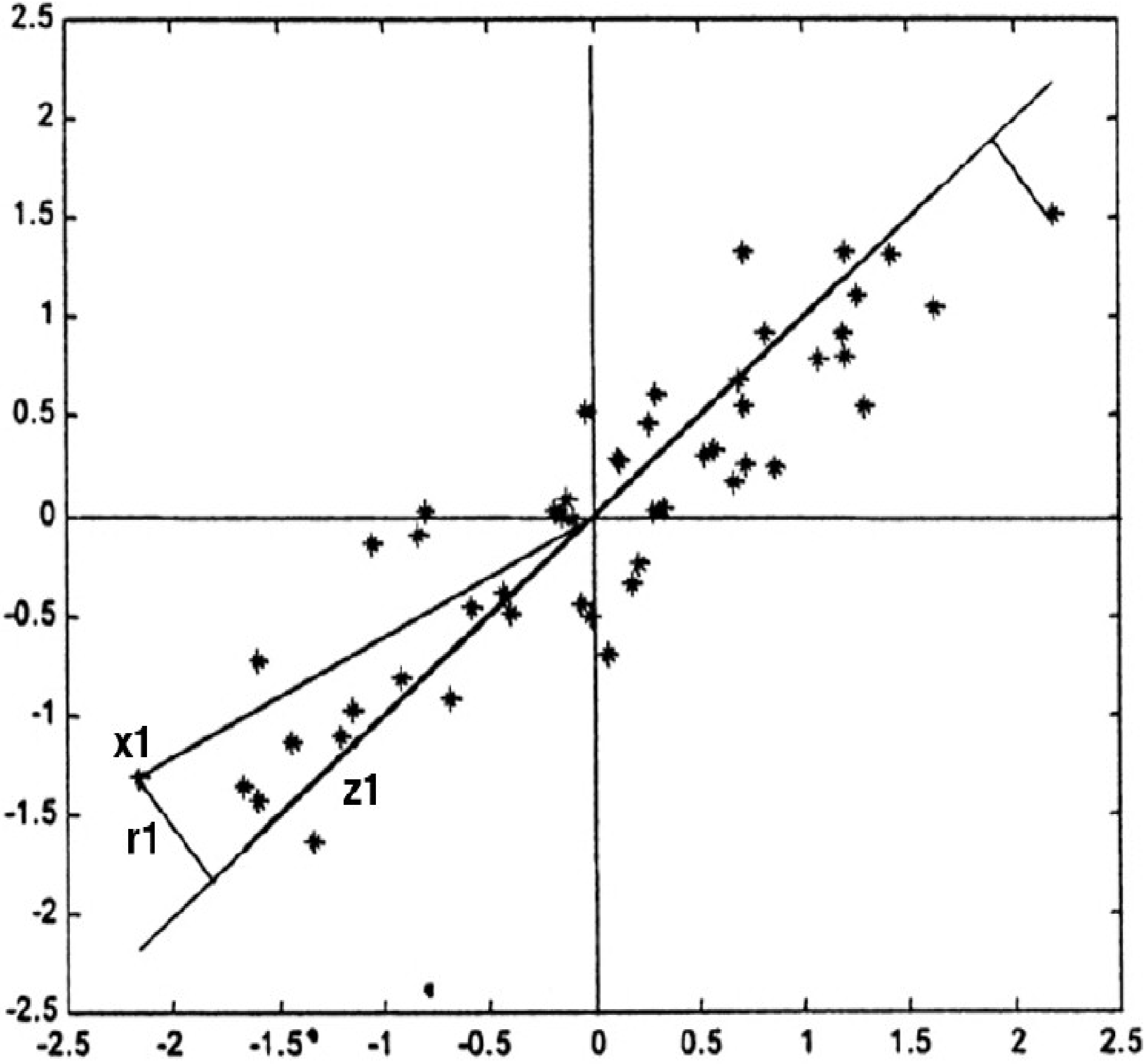
Motivación general

- Tenemos un dataset **X** con *n* datos y *p* dimensiones, centrado (medias 0).
- Queremos encontrar una representación de esos mismos datos en un espacio de menor dimensión
  - Para visualizarlos (entenderlos!)
  - Para modelarlos mejor
- Cuál es la proyección óptima?

Motivación

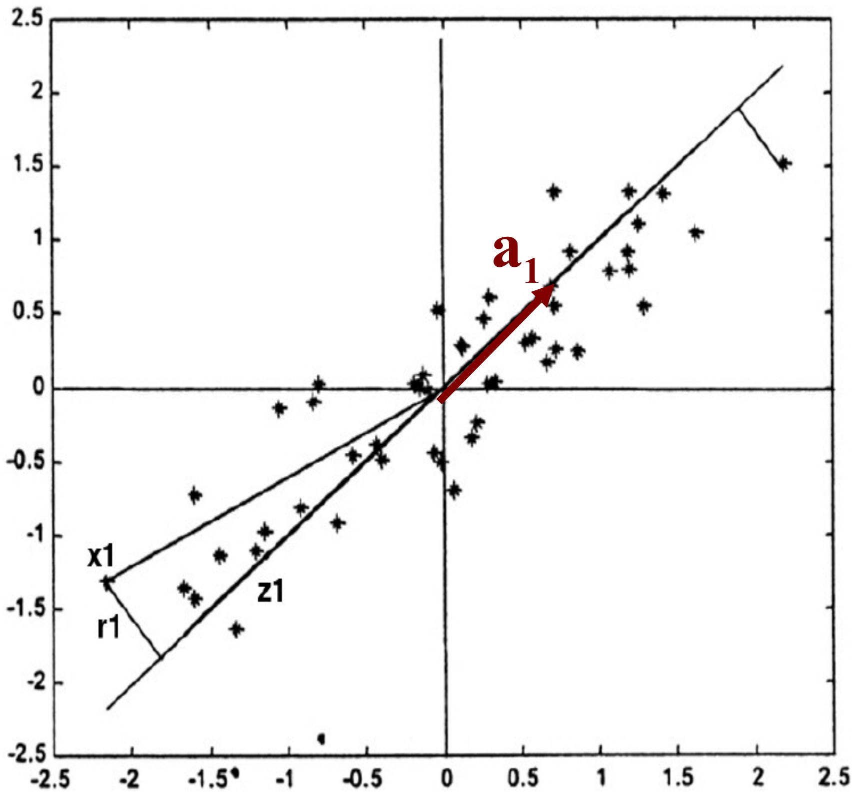
- Queremos una proyección lineal tal que los datos conserven lo más posible su estructura (relación de distancias).
- Ejemplo:
  - Datos en 2 dimensiones.
  - Proyectamos sobre una recta
  - Cuál es la recta que introduce menos distorsión?

Motivación



- La recta debe pasar cerca de la mayoría de los puntos.
- La distancia entre los puntos y entre sus proyecciones sobre la recta deben parecerse lo más posible

Notación



- Versor paralelo a la recta $\mathbf{a_1}=(a_{11},a_{12},\ldots,a_{1p})$
- $Z_1=\mathbf{a'_1X_1}$
- $\mathbf{Z_1}=Z_1\mathbf{a_1}$
- Pitágoras: $\mathbf{x_1'x_1}=Z_1^2+r_1^2$
- $$\sum_{i=1}^{n} \mathrm{x}_i'\mathrm{x}_i = \sum_{i=1}^{n} z_i^2 + \sum_{i=1}^{n} r_i^2 .$$

- Para que los **Z** y los **X** sean similares tenemos que minimizar a los **r**

Motivación

$$\sum_{i=1}^{n} \mathrm{x}_i' \mathrm{x}_i = \sum_{i=1}^{n} z_i^2 + \sum_{i=1}^{n} r_i^2.$$

- El primer miembro es constante
- Para minimizar el último sumando tengo que maximizar el primer sumando.
- Como los Z tienen media cero, estamos:

  MAXIMIZANDO LA VARIANZA DE LAS PROYECCIONES

Definición

- La primer componente principal es la dirección en la cual los datos tienen máxima varianza
  - Dirección=combinación lineal de las variables originales
- La segunda componente principal es la dirección ortogonal a la anterior en la cual hay máxima varianza
  - Es la primer componente del subespacio que queda
- hasta p…

Derivación

- Buscamos los vectores: $\mathbf{z}_1 = \mathbf{X}\mathbf{a}_1$

tales que la var(Z) sea máxima.

Como Z tiene media 0: $\frac{1}{n}\mathbf{z}_1'\mathbf{z}_1 = \frac{1}{n}\mathbf{a}_1'\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_1'\mathbf{S}\mathbf{a}_1$

donde S es la matriz de covarianza de los datos.

Para que el problema tenga sentido pedimos que a sea de modulo unitario: $\mathbf{a}_1'\mathbf{a}_1 = 1$

Derivación

- La restricción se introduce con un multiplicador de Lagrange:

$$M = \mathbf{a}_1' \mathbf{S} \mathbf{a}_1 - \lambda(\mathbf{a}_1' \mathbf{a}_1 - 1)$$

Queremos el máximo, derivamos:

$$\frac{\partial M}{\partial \mathbf{a}_1} = 2\mathbf{S}\mathbf{a}_1 - 2\lambda \mathbf{a}_1 = 0,$$

$$\mathbf{S}\mathbf{a}_1 = \lambda \mathbf{a}_1$$

Derivación

- Las direcciones principales son los autovectores de la matriz de covarianza
- Como: $\mathrm{a}_1' \mathrm{S} \mathrm{a}_1 = \lambda \mathrm{a}_1' \mathrm{a}_1 = \lambda$

La varianza de z es el autovalor. La primer DP es la del mayor autovalor. Las otras sucesivamente.

Complejidad

- Es del orden de $O(np^2+p^3)$
- Para calcular S: np^2
- Para autovalores de S: p^3

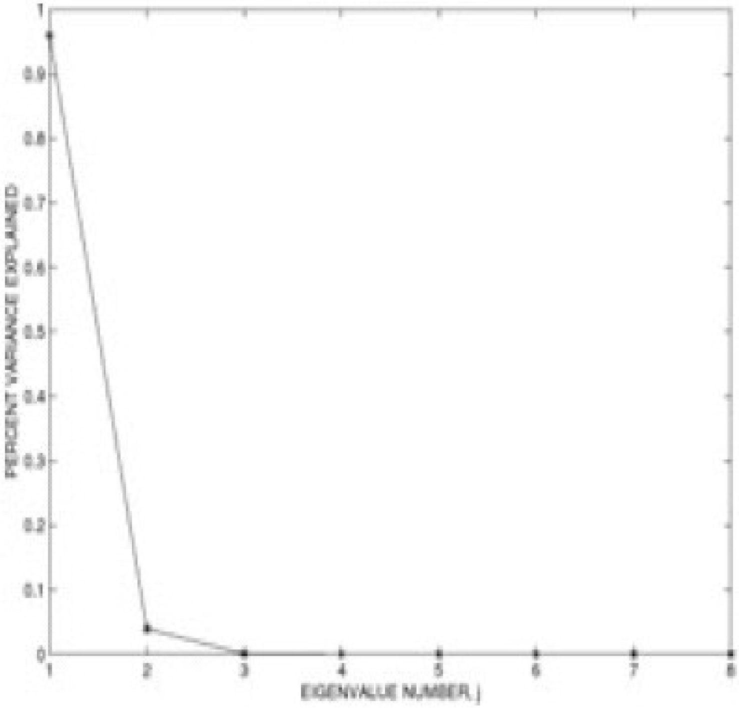
- Lineal en n, pero cúbico en p!

Uso práctico

- Cuántas dimensiones necesito conservar?
- Varianza explicada: $\lambda / \Sigma\lambda$
- Dejar las direcciones que conservan “casi toda” la varianza

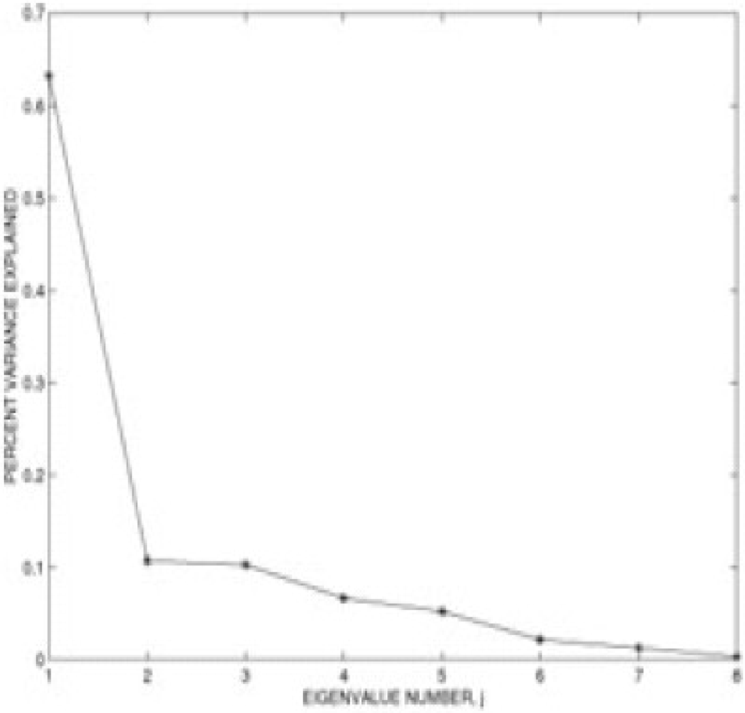
Correlación

- Datos sin normalizar – distintas varianzas para cada variable original
- Cuando las relaciones entre las variables tienen sentido físico-real



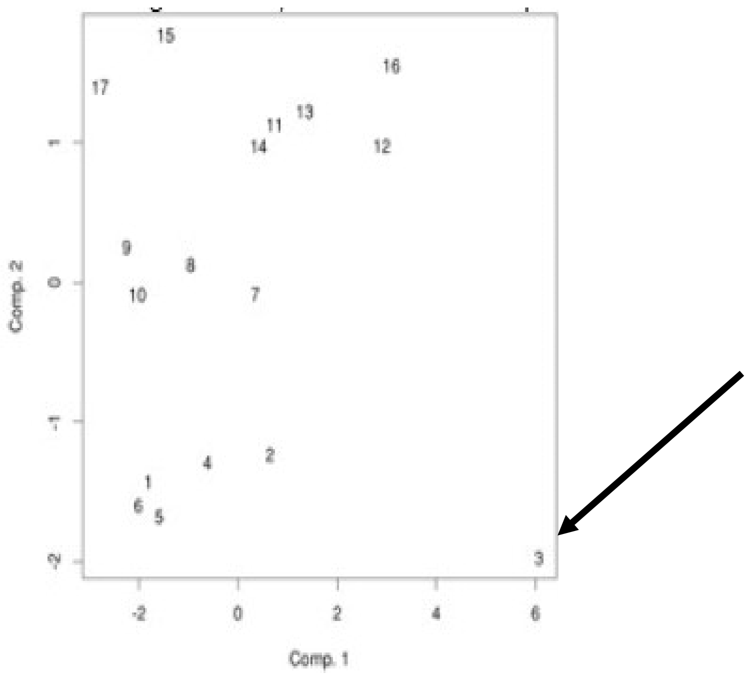
Covarianza

- Datos normalizados previamente (z-scores)
- Cuando las variables son inconmensurables (no tienen relación)
- La mayoría de los casos reales



Ejemplos

- Detección de outliers usando PCA



Ejemplos en R

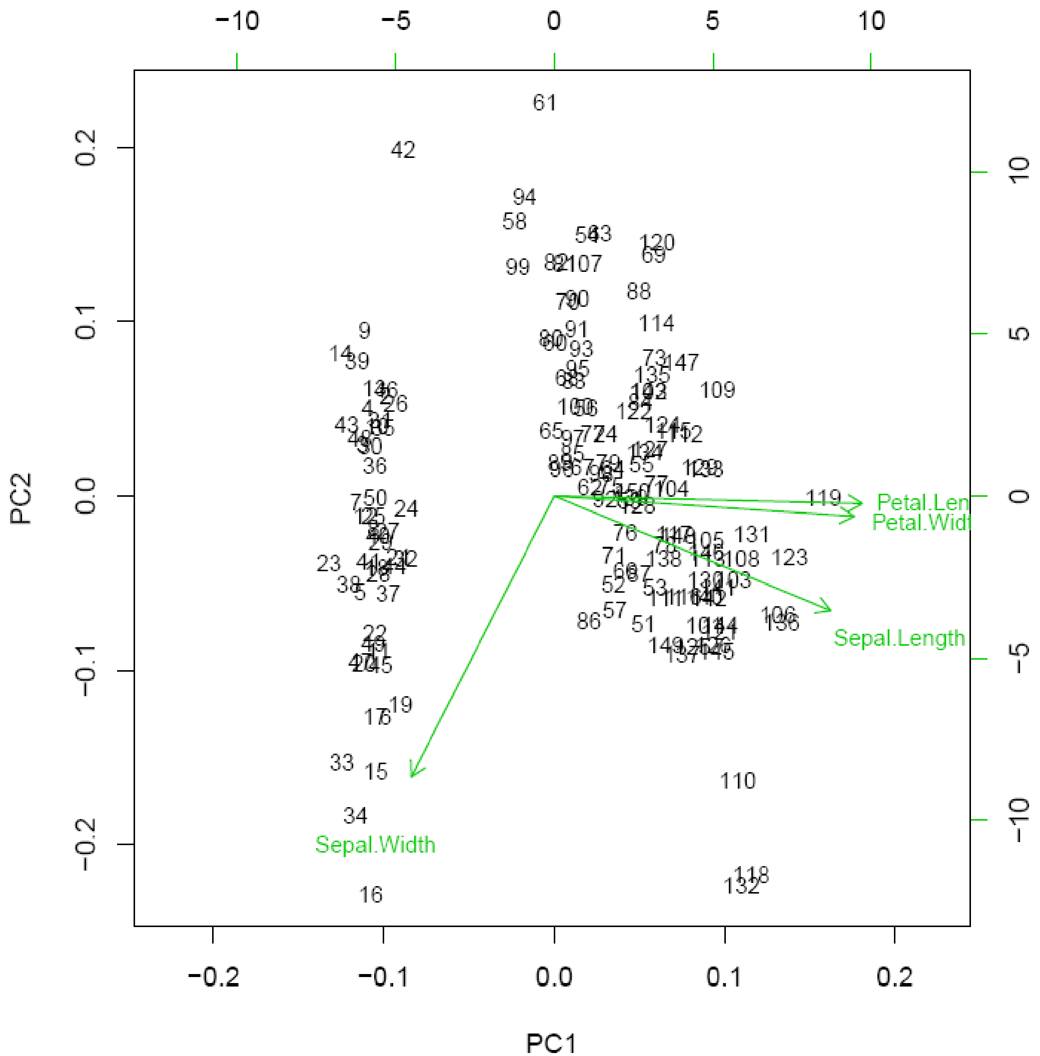
```
datos<-crea.datos(2000,d=9,n.ce=0,C=1)
plot(datos[,1:5],col=datos[,10])
datos.pca<-prcomp(datos[,-10],ret.x=T)
x11()
plot(datos.pca)
x11()
plot(datos.pca$x[,1:2],pch=17,col=datos[,10])
#en 100 dimensiones:
datos<-crea.datos(2000,d=100,n.ce=0,C=0.3)
x11()
plot(datos[,1:5],col=datos[,101])        #verificar que son las mismas variables
datos.pca<-prcomp(datos[,-101],ret.x=T)
x11()
plot(datos.pca$x[,1:2],pch=17,col=datos[,101])
```

Interpretación

- PCA hace una proyección lineal, un giro de los ejes.
- Cada "eje principal" es una combinación lineal de las variables originales.
- Se puede buscar evidencia sobre la importancia de las variables originales evaluando su aporte a las PC.
- Se suele hacer gráficamente

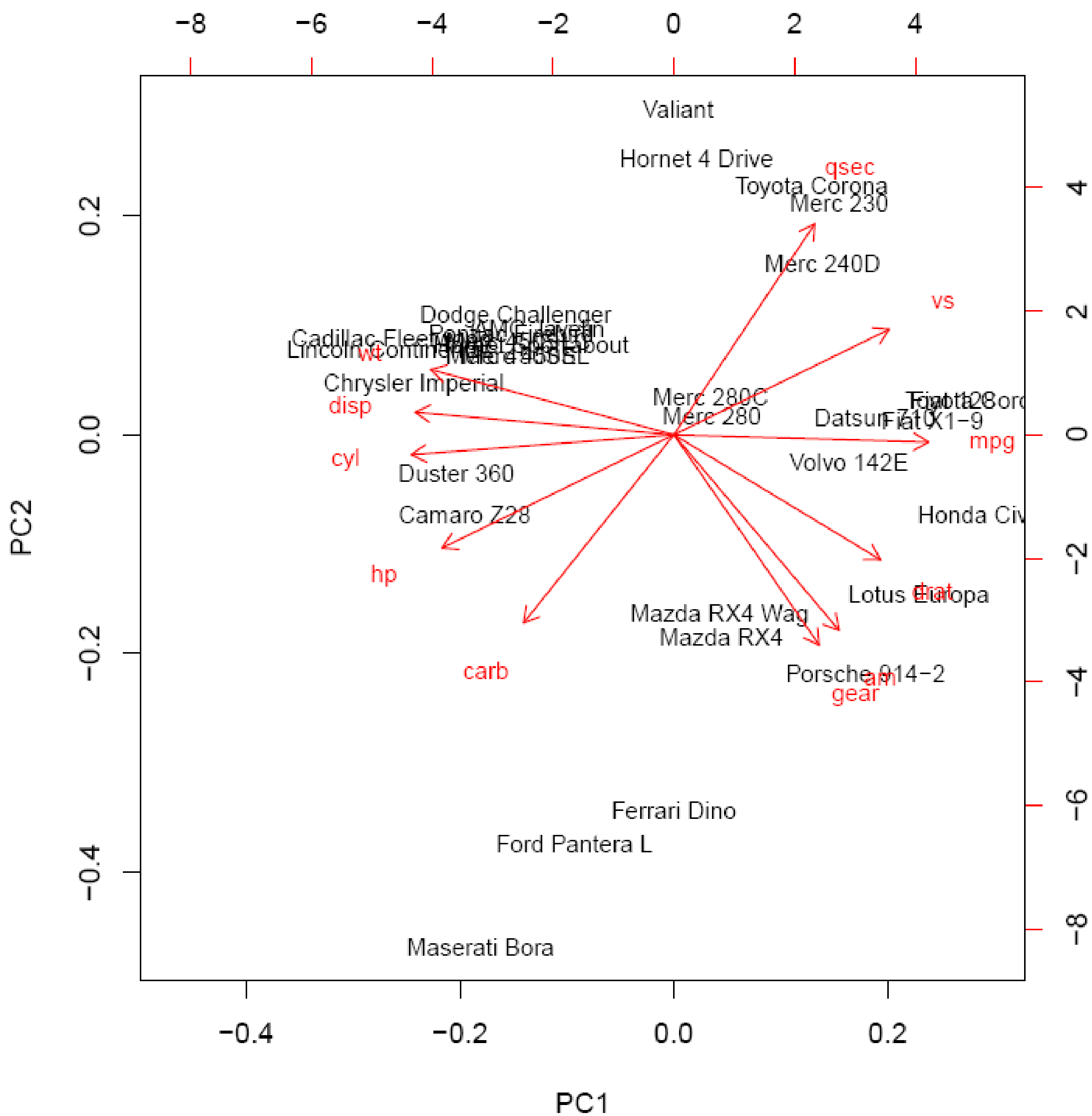
Interpretación: gráficas

>biplot(prcomp(iris[,-5], scale = TRUE))



Interpretación: gráficas

>biplot(prcomp(mtcars, scale = TRUE),choices=c(1,2),cex=0.8)



Resumen

- PCA: Proyecciones lineales en bajas dimensiones que explican los datos lo mejor posible.
- Las direcciones principales son los autovectores de la matriz de covarianza.
- La importancia de cada dirección esta relacionada con su varianza explicada (autovalores).

Extra: Multi-Dimensional Scaling

- MDS. Método general.
- Busca representar los datos en un espacio de menor dimensión respetando las distancias entre los objetos.
- PCA es un caso muy particular de MDS
- MDS se basa sólo en distancias entre puntos. No se necesita que los puntos estén en un espacio vectorial. Sólo las distancias. Por ejemplo:
  - grados arbitrarios de similitud entre vinos
  - cantidad de nodos entre dos computadoras

Ejemplo de MDS

- Código R:

```
loc <- cmdscale(eurodist)

x <- loc[,1]

y <- -loc[,2]

plot(x, y, type="n", xlab="", ylab="",
  main="cmdscale(eurodist)")

text(x, y, rownames(loc), cex=0.8)
```