



# Reducción de Dimensionalidad

Machine Learning



# Agenda

1. Motivación
2. Análisis de Componentes Principales
3. Implementación Práctica
4. Aplicación de PCA



# Motivación

# Motivación

En esta clase vamos a tratar un tema particular del aprendizaje no supervisado que es la **reducción de dimensionalidad**.



# ¿Qué modelo elegir?

Después de mucho pensar, llegan a las siguientes opciones:

- Tener más datos para el entrenamiento.
- Considerar menos características.
- Obtener más características.
- Considerar combinaciones de características más complejas.
- Aumentar o reducir el valor de  $\lambda$ .



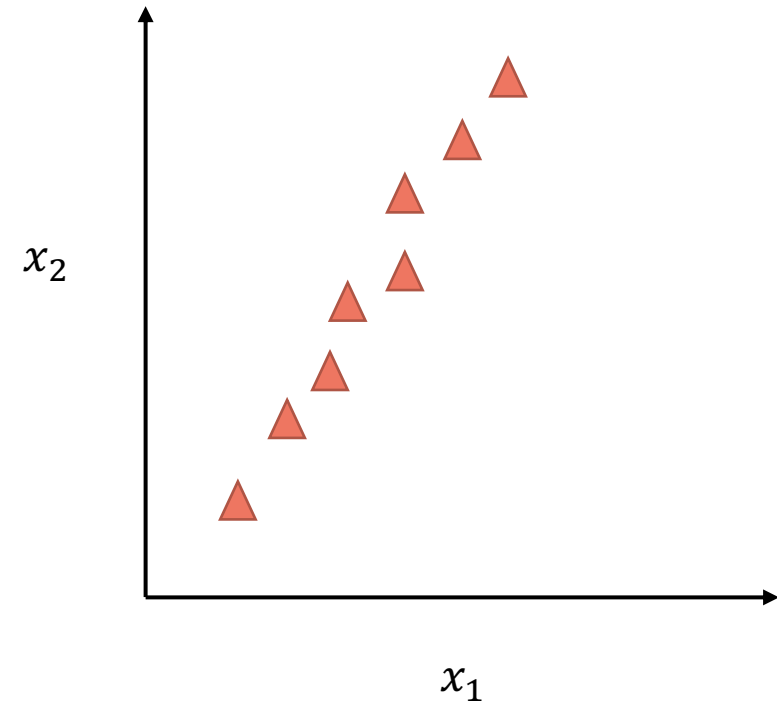
# ¿Qué modelo elegir?

Considerando las opciones iniciales, tenemos que:

- Tener más datos para el entrenamiento. → *resuelve* varianza alta
- Considerar menos características. → *resuelve* varianza alta
- Obtener más características. → *resuelve* sesgo alto
- Considerar combinaciones de características más complejas. → *resuelve* sesgo alto
- Aumentar el valor de  $\lambda$ . → *resuelve* varianza alta
- Reducir el valor de  $\lambda$ . → *resuelve* sesgo alto

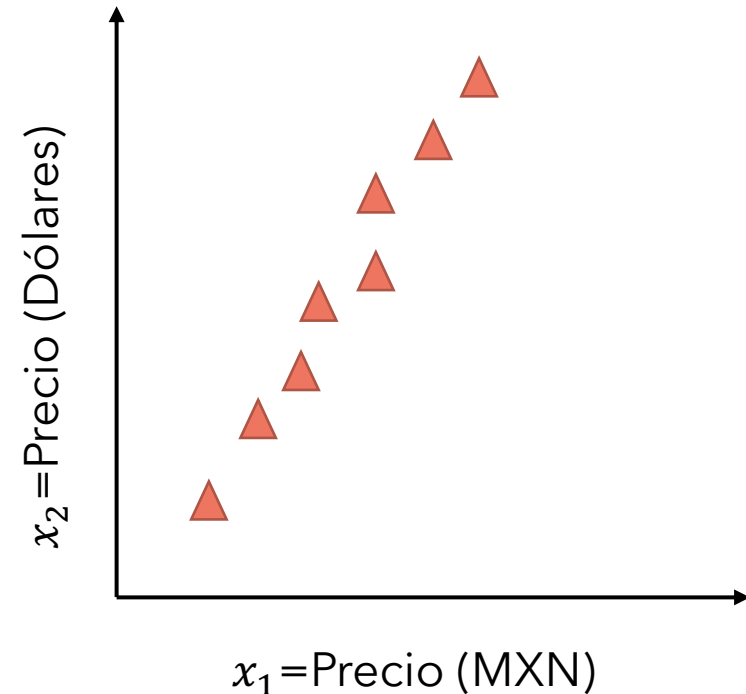
# Motivación

- Rara vez las características de un modelo son las adecuadas.
- Puede necesitar más o menos.
- ¿Cómo determinar aquellas que *sobran*?



# Motivación

- Rara vez las características de un modelo son las adecuadas.
- Puede necesitar más o menos.
- ¿Cómo determinar aquellas que *sobran*?





# Motivación

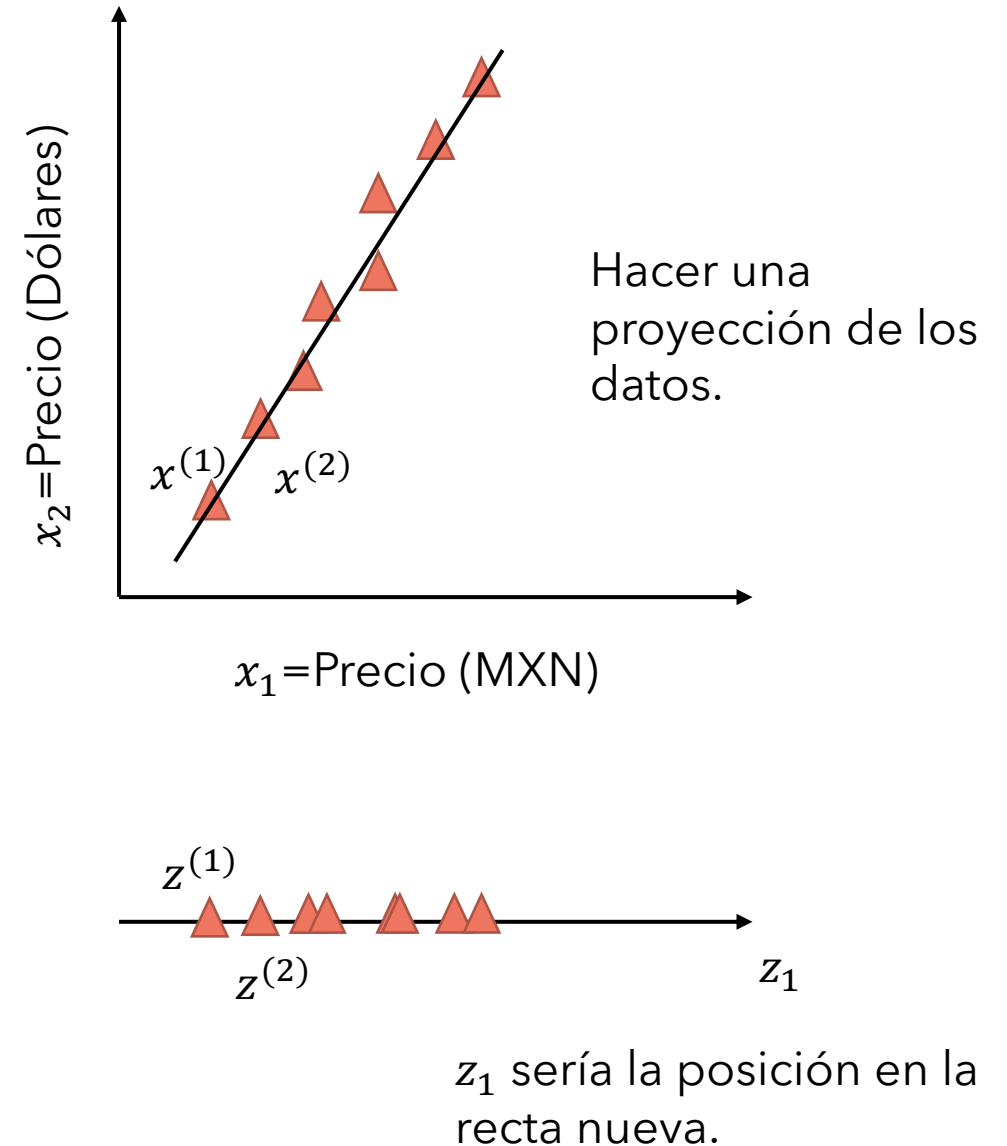
Reducir la dimensionalidad de la información

$$f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$$

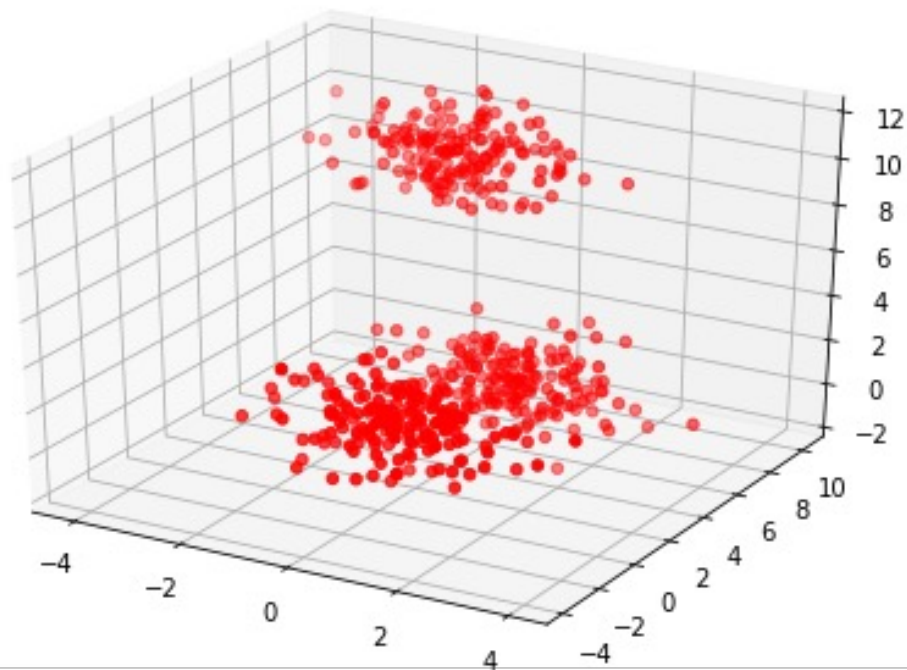
$$x^{(1)} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow z^{(1)} \in \mathbb{R}$$

$$x^{(2)} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow z^{(2)} \in \mathbb{R}$$

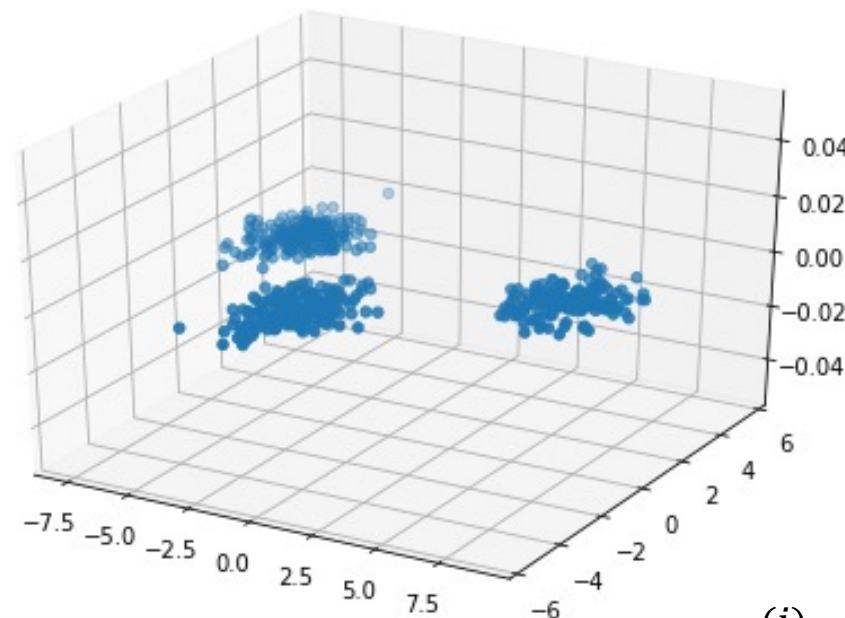
$\vdots$



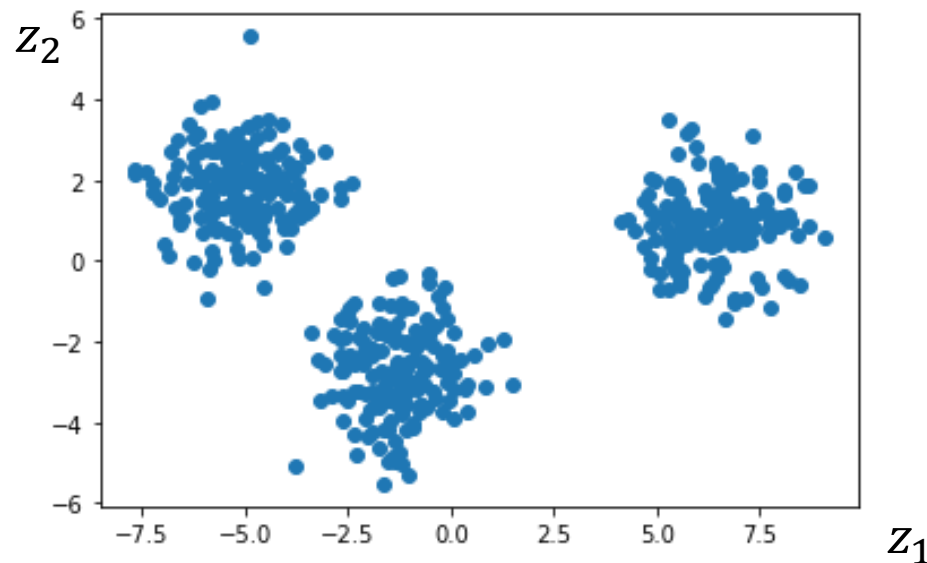
# Motivación



$$x^{(i)} \in \mathbb{R}^3$$



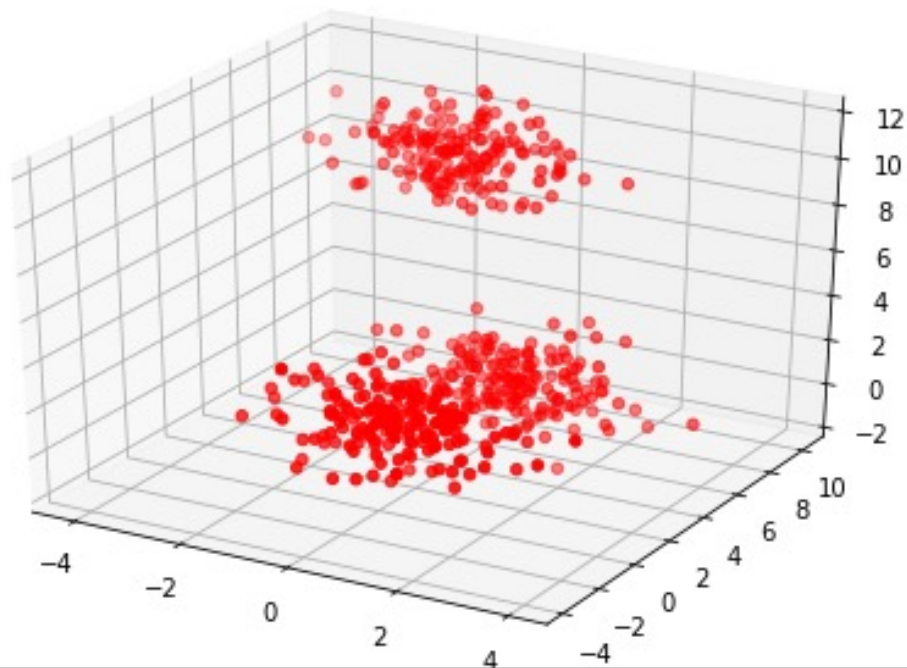
$$z^{(i)} \in \mathbb{R}^2$$



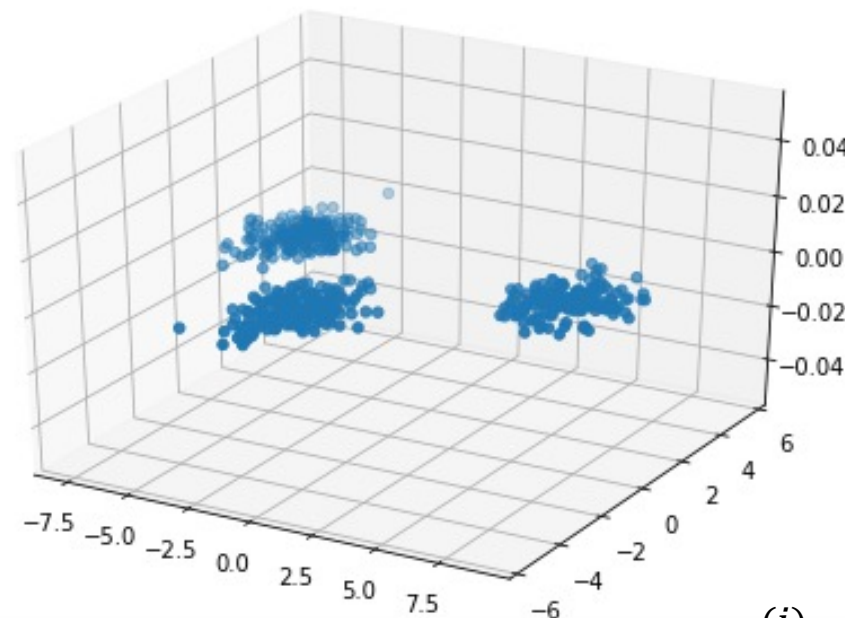
Disminuir de  
 $\mathbb{R}^3$  a  $\mathbb{R}^2$

$$z^{(i)} = (z_1^{(i)}, z_2^{(i)})$$

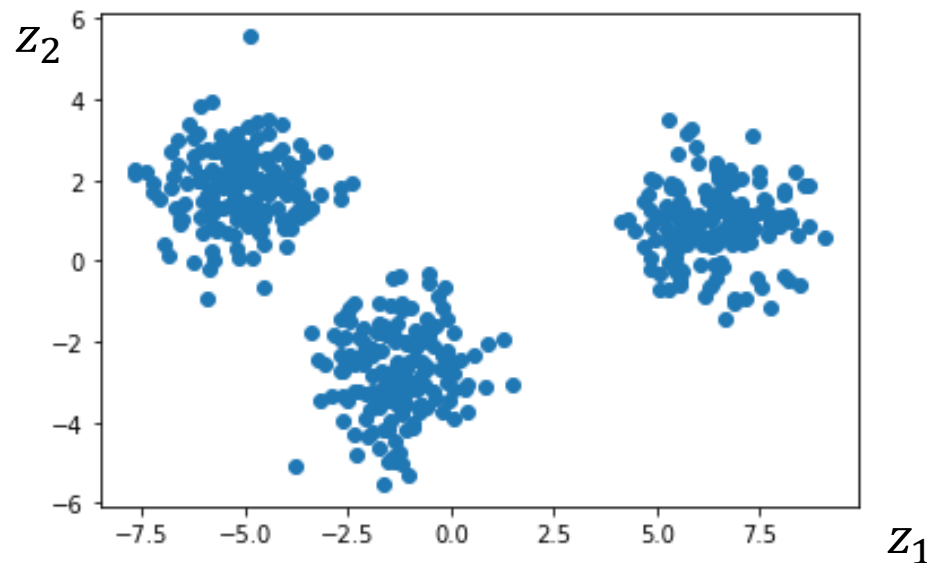
# Motivación



$$x^{(i)} \in \mathbb{R}^3$$




$$z^{(i)} \in \mathbb{R}^2$$



Disminuir de  
 $\mathbb{R}^3$  a  $\mathbb{R}^2$


$$z^{(i)} = (z_1^{(i)}, z_2^{(i)})$$



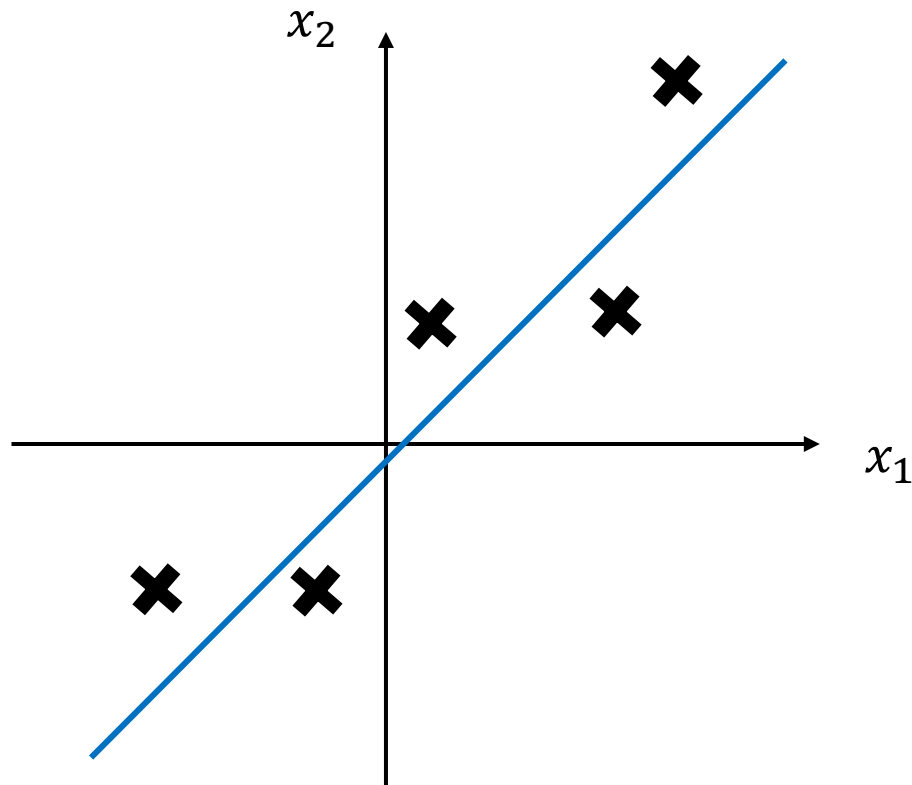
# Análisis de Componentes Principales



# Análisis de Componentes Principales

- Es una técnica que permite comprimir información.
  - Permite encontrar un nuevo conjunto de variables, de dimensión menor a las originales, que retienen la mayor parte de la información de los datos.
  - Por información se refiere a la variación de los datos.
- 

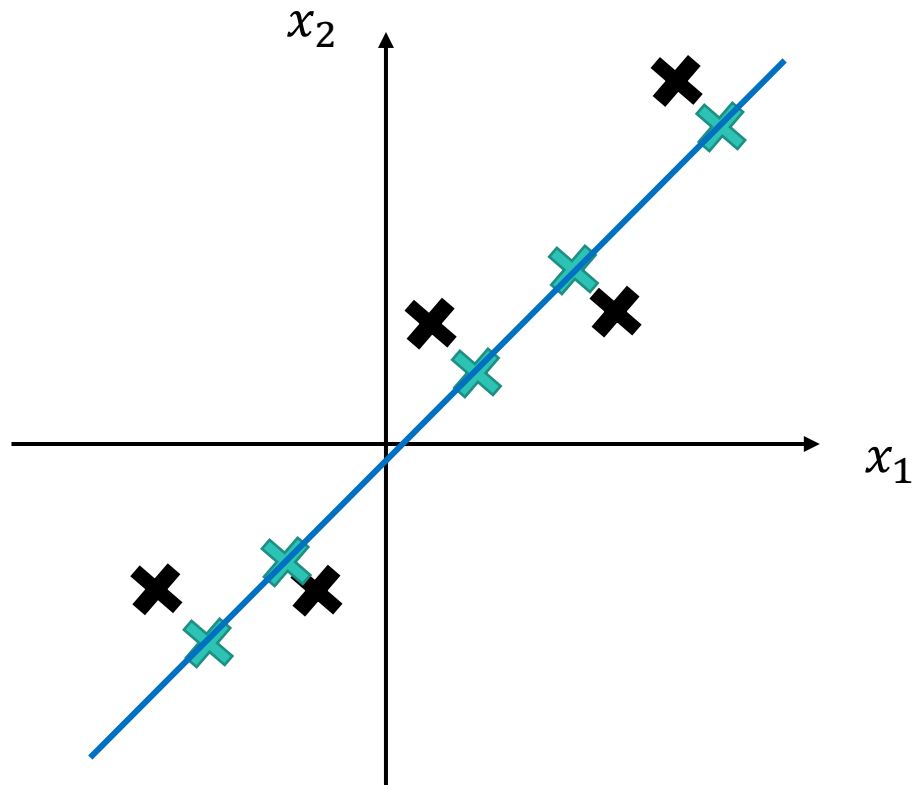
# Análisis de Componentes Principales



Tenemos datos en  $\mathbb{R}^2$  y deseamos reducir la dimensionalidad a  $\mathbb{R}$ .

**Idea principal:** determinar la recta en la cual vamos a proyectar los datos.

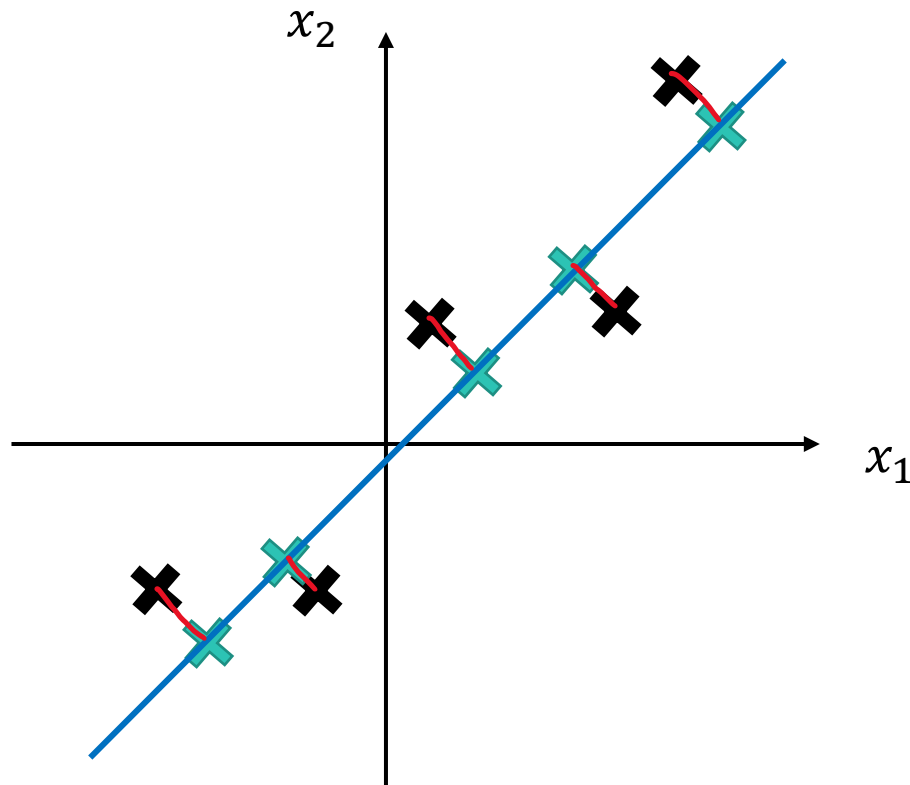
# Análisis de Componentes Principales



Tenemos datos en  $\mathbb{R}^2$  y deseamos reducir la dimensionalidad a  $\mathbb{R}$ .

**Idea principal:** determinar la recta en la cual vamos a proyectar los datos.

# Análisis de Componentes Principales



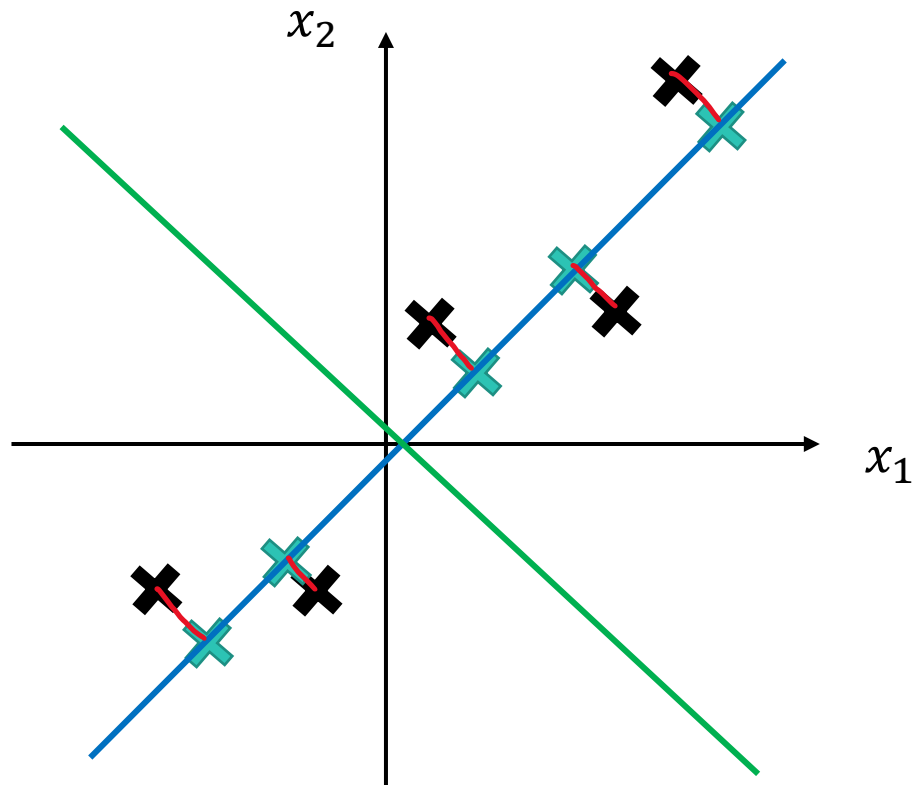
Tenemos datos en  $\mathbb{R}^2$  y deseamos reducir la dimensionalidad a  $\mathbb{R}$ .

**Idea principal:** determinar la recta en la cual vamos a proyectar los datos.

Minimizando la suma cuadrática de las distancias (en rojo) de las proyecciones.



# Análisis de Componentes Principales

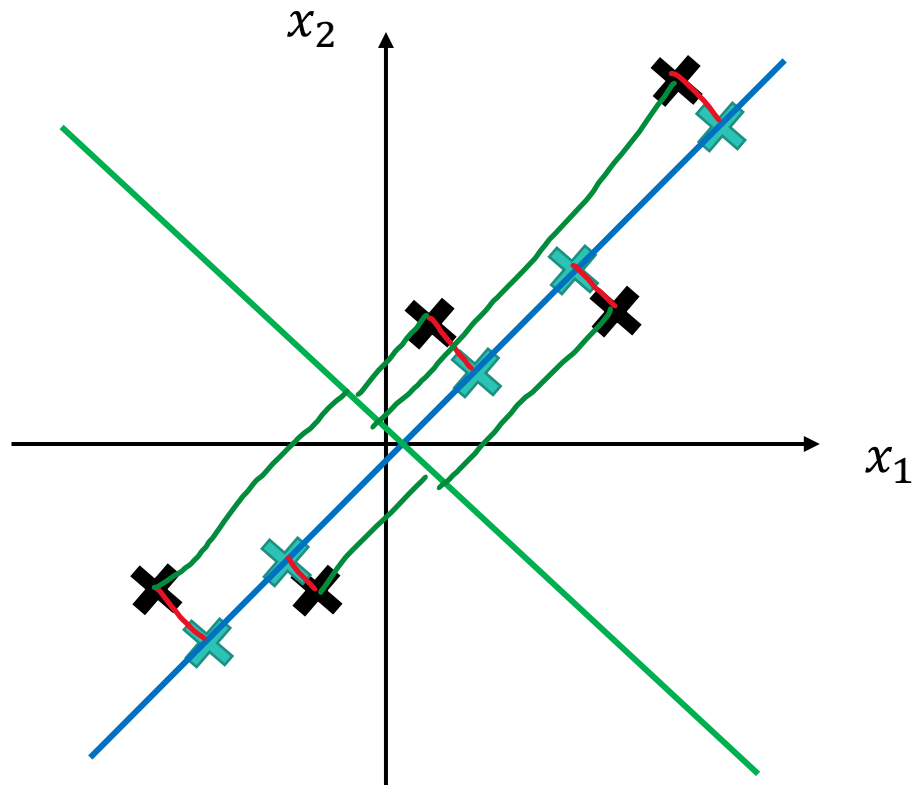


Tenemos datos en  $\mathbb{R}^2$  y deseamos reducir la dimensionalidad a  $\mathbb{R}$ .

**Idea principal:** determinar la recta en la cual vamos a proyectar los datos.

Minimizando la suma cuadrática de las distancias (en rojo) de las proyecciones.

# Análisis de Componentes Principales

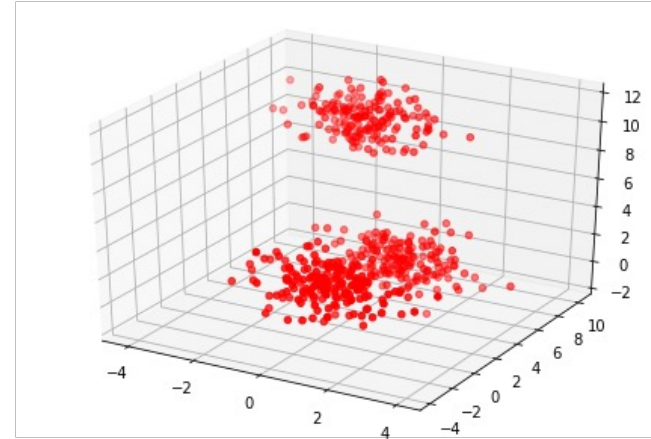
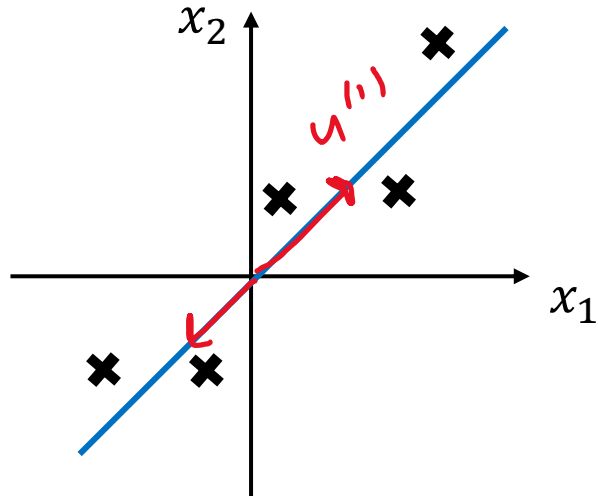


Tenemos datos en  $\mathbb{R}^2$  y deseamos reducir la dimensionalidad a  $\mathbb{R}$ .

**Idea principal:** determinar la recta en la cual vamos a proyectar los datos.

Minimizando la suma cuadrática de las distancias (en rojo) de las proyecciones.

# Análisis de Componentes Principales



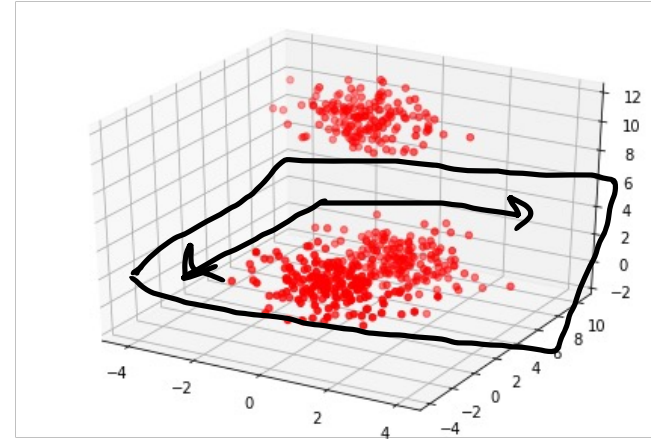
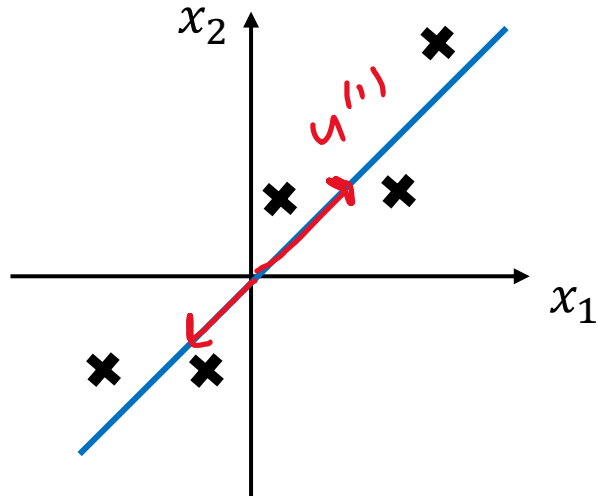
Reducir de  $\mathbb{R}^2$  a  $\mathbb{R}$ :

Encontrar un vector  $u^{(1)} \in \mathbb{R}^n$  en el cual proyectar los datos de tal manera que se minimice el error de proyección.

Reducir de  $\mathbb{R}^m$  a  $\mathbb{R}^k$ :

Encontrar  $k$  vectores  $u^{(1)}, u^{(2)}, \dots, u^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  en el cual proyectar los datos de tal manera que se minimice el error de proyección.

# Análisis de Componentes Principales



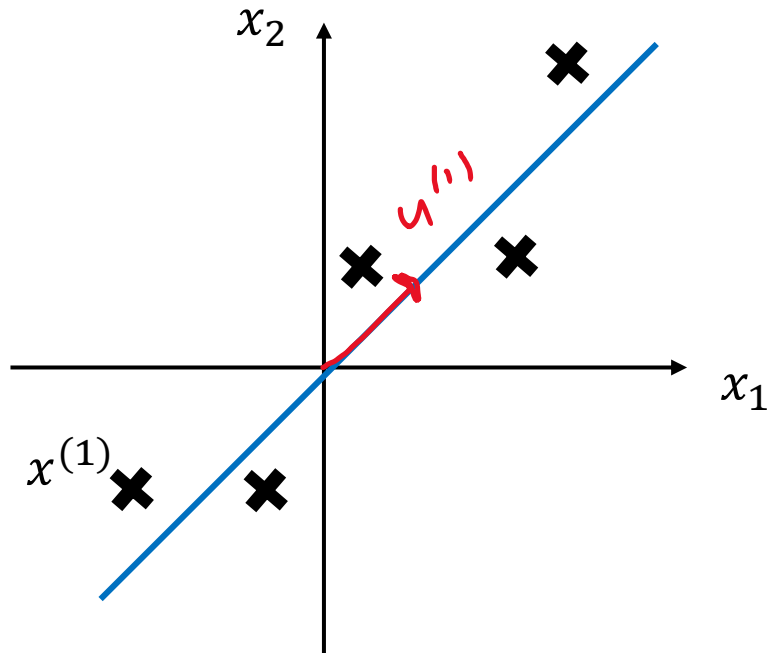
Reducir de  $\mathbb{R}^2$  a  $\mathbb{R}$ :

Encontrar un vector  $u^{(1)} \in \mathbb{R}^n$  en el cual proyectar los datos de tal manera que se minimice el error de proyección.

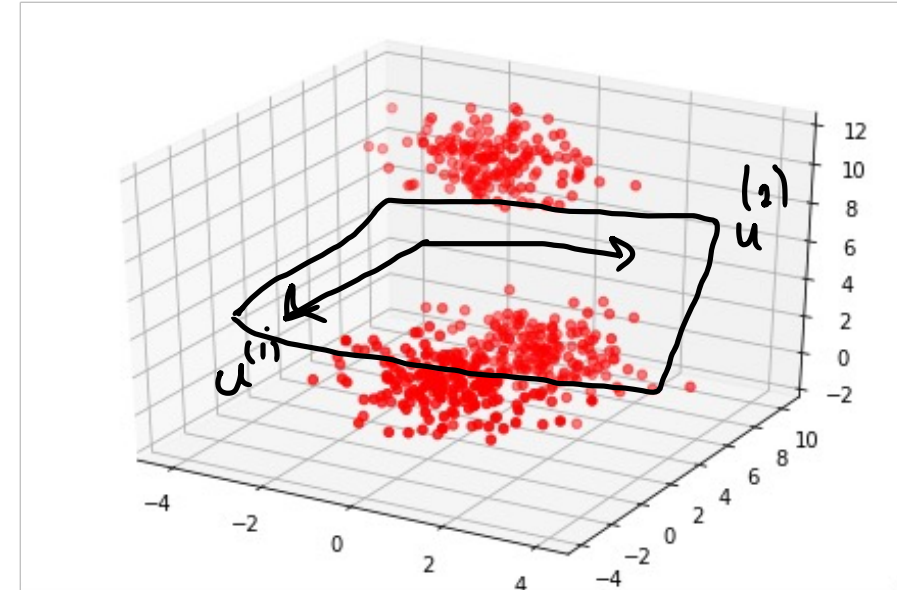
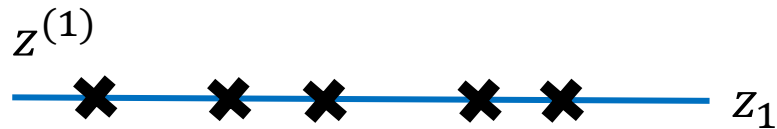
Reducir de  $\mathbb{R}^m$  a  $\mathbb{R}^k$ :

Encontrar  $k$  vectores  $u^{(1)}, u^{(2)}, \dots, u^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  en el cual proyectar los datos de tal manera que se minimice el error de proyección.

# Análisis de Componentes Principales



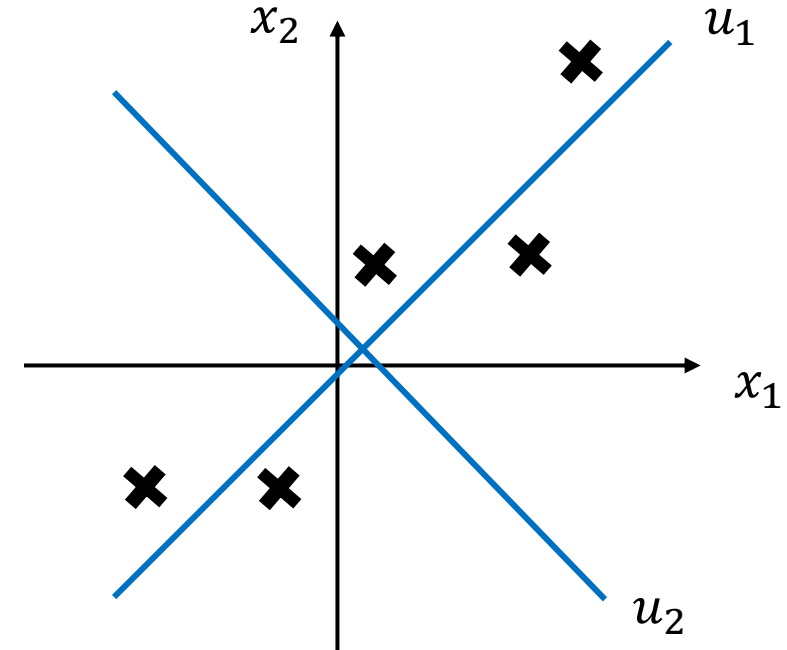
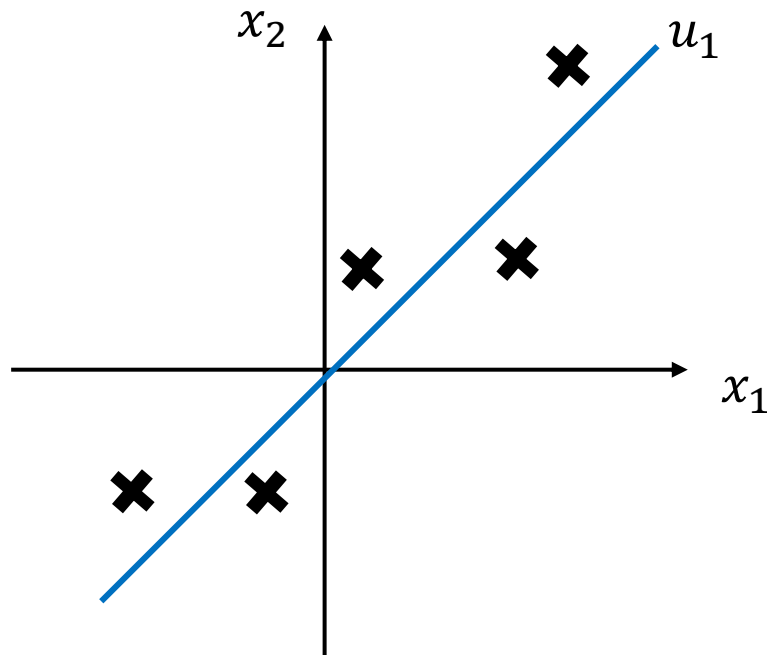
$$x^{(i)} \in \mathbb{R}^2 \rightarrow z^{(i)} \in \mathbb{R}$$



$$x^{(i)} \in \mathbb{R}^3 \rightarrow z^{(i)} \in \mathbb{R}^2$$

Debemos determinar los vectores  $u^{(i)}$  y los valores  $z^{(i)}$ .

# Análisis de Componentes Principales



- El **primer componente principal**  $u_1$  es el hiperplano que minimice la distancia cuadrática de los datos.
- El **segundo componente principal**  $u_2$  es el hiperplano perpendicular a el primer componente que minimice la distancia cuadrática de los datos.
- En general, se ajusta un hiperplano que minimice la distancia cuadrático con los datos, cada uno **ortogonal a todos los anteriores**.

# Análisis de Componentes Principales

Dado un conjunto de datos  $X = (x^{(1)}, \dots, x^{(n)})$ , donde  $x^{(i)} \in \mathbb{R}^p$ , se define **la primer componente principal** como:

$$u_1 \equiv \mathbf{a}_1^T \mathbf{x} = \sum_{i=1}^p \mathbf{a}_{i1} x_i$$

donde el vector  $\mathbf{a}_1 = (a_{11}, a_{21}, \dots, a_{p1})$  se elige tal que  $\text{var}(u_1)$  **es máxima**.

# Análisis de Componentes Principales

El  $k$ -ésimo componente principal se define como

donde el vector se elige tal que sujeto a y, además,

$$u_k \equiv \mathbf{a}_k^T \mathbf{x} \quad k = 1, \dots, p$$

$$\mathbf{a}_k = (a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{pk})$$

$\text{var}(u_1)$  es máxima

$$\text{cov}(u_k, u_l) = 0 \quad \text{para } k > l \geq 1$$

$$\mathbf{a}_k^T \mathbf{a}_k = 1$$



# Análisis de Componentes Principales

Para encontrar  $\mathbf{a}_1$ , recordemos que

$$\text{var}(u_1) = E[u_1^2] - E[u_1]^2$$

ya que  $u_1$  es un vector que es una combinación lineal de  $\mathbf{a}_1$ ,

$$E[\mathbf{a}_1^T x] = \mathbf{a}_1^T E[x]$$

y

$$\begin{aligned}\text{var}[u_1] &= E[\mathbf{a}_1^T x x^T \mathbf{a}_1] - E[\mathbf{a}_1^T x] E[\mathbf{a}_1^T x]^T \\ &= \mathbf{a}_1^T E[x x^T] \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_1^T E[x] E[x]^T \mathbf{a}_1 \\ &= \mathbf{a}_1^T (E[x x^T] - E[x] E[x]^T) \mathbf{a}_1 \\ &= \mathbf{a}_1^T \text{Cov}(x) \mathbf{a}_1\end{aligned}$$

Donde  $\text{Cov}(x)$  es la matriz de covarianza de los datos  $x^{(i)} \in \mathbb{R}^p$ .

# Análisis de Componentes Principales

Para encontrar  $\mathbf{a}_1$ , se maximiza  $\text{var}[u_1]$  sujeto a  $\mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_1 = 1$ . Vamos a resolverlo con multiplicadores de Lagrange. La ecuación que resulta es

$$\mathbf{a}_1^T S \mathbf{a}_1 - \lambda(\mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_1 - 1)$$

**Actividad:** deriven con respecto a  $\mathbf{a}_1$  e igualen a 0.

# Análisis de Componentes Principales

Para encontrar  $\mathbf{a}_1$ , se maximiza  $\text{var}[u_1]$  sujeto a  $\mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_1 = 1$ . Vamos a resolverlo con multiplicadores de Lagrange. La ecuación que resulta es

$$\mathbf{a}_1^T \mathbf{S} \mathbf{a}_1 - \lambda (\mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_1 - 1)$$

Derivando e igualando a cero, se tiene que

$$\mathbf{S} \mathbf{a}_1 - \lambda \mathbf{a}_1 = 0$$

o bien

$$(\mathbf{S} - \lambda \mathbf{I}) \mathbf{a}_1 = 0$$

Es decir,  $\mathbf{a}_1$  es un **eigenvector** de  $\mathbf{S}$  correspondiente al eigenvalor  $\lambda \equiv \lambda_1$ .

# Análisis de Componentes Principales

Al maximizar  $\text{var}[u_1]$  encontramos que

$$\text{var}[u_1] = \mathbf{a}_1^T \mathbf{S} \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_1^T \lambda_1 \mathbf{a}_1 = \lambda_1$$

Es decir,  $\lambda_1$  es el mayor eigenvalor de  $\mathbf{S}$ .

# Análisis de Componentes Principales

Para encontrar el siguiente vector de coeficientes  $\mathbf{a}_2$ , se plantea el siguiente problema:

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar } \text{var}[u_2] \\ &\text{sujeto a } \text{cov}[u_2, u_1] = 0 \\ &\quad \mathbf{a}_2^T \mathbf{a}_2 = 1 \end{aligned}$$

Notando que:

$$\text{cov}[u_2, u_1] = \mathbf{a}_1^T \mathbf{S} \mathbf{a}_2 = \lambda_1 \mathbf{a}_1^T \mathbf{a}_2$$

Si  $\lambda$  y  $\varphi$  son multiplicadores de Lagrange, se desea maximizar

$$\mathbf{a}_2^T \mathbf{S} \mathbf{a}_2 - \lambda(\mathbf{a}_2^T \mathbf{a}_2 - 1) - \varphi \mathbf{a}_2^T \mathbf{a}_1$$

# Análisis de Componentes Principales

Al resolver el problema de optimización se encuentra que  $\mathbf{a}_2$  también es un eigenvector de  $\mathbf{S}$  cuyo eigenvalor  $\lambda \equiv \lambda_2$  es el segundo más grande.

En general

$$\text{var}[u_k] = \mathbf{a}_k^T \mathbf{S} \mathbf{a}_k = \lambda_k.$$

- El  $k$ -ésimo más grande eigenvalor de  $\mathbf{S}$  es la varianza de la  $k$ -ésima componente principal.
- La  $k$ -ésima componente principal  $u_k$  retiene la  $k$ -ésima fracción de la variación de los datos.
- El eigenvector asociado permite determinar las proyecciones de los datos.

# Análisis de Componentes Principales

Dado una colección de datos  $X = (x^{(1)}, \dots, x^{(n)})$ , donde  $x^{(i)} \in \mathbb{R}^p$  se define un vector de  $p$  componentes principales

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_p)$$

de acuerdo a  $\mathbf{z} = \mathbf{A}^T \mathbf{x}$ , donde  $\mathbf{A}^{p \times p}$  es una matriz ortogonal cuya  $k$ -ésima columna es el  $k$ -ésimo eigenvector  $\mathbf{a}_k$  de  $\mathbf{S}$ .

# Análisis de Componentes Principales

Antes de empezar el procedimiento, siempre hay que **centrar los datos**. Esto es, si la media para la  $j$ -ésima característica del vector de datos  $x_j^{(i)}$  esta dada por

$$\mu_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_j^{(i)},$$

se reemplaza  $x_j^{(i)}$  con  $x_j^{(i)} - \mu_j$ .



# Análisis de Componentes Principales

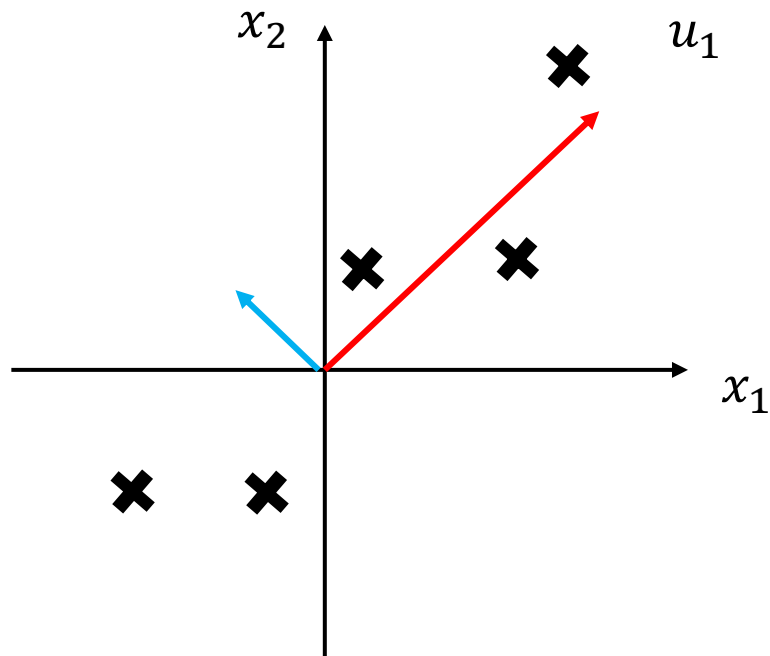
Para el cómputo práctico de PCA:

1. Determinar la matriz de covarianza

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}$$

2. Se calculan los eigenvectores y eigenvalores de la matriz de covarianza.
3. Se construye la matriz  $\mathbf{A}^{n \times k}$ . *(Alternativamente, se eligen los  $k$  eigenvectores cuyo eigenvalor sea el más grande).*
4. Se calcula la proyección  $\mathbf{Z} = \mathbf{XA}$

# Análisis de Componentes Principales



$$S = \begin{bmatrix} \text{Var}[X] & \text{Cov}(X, Y) \\ \text{Cov}(X, Y) & \text{Var}[Y] \end{bmatrix}$$

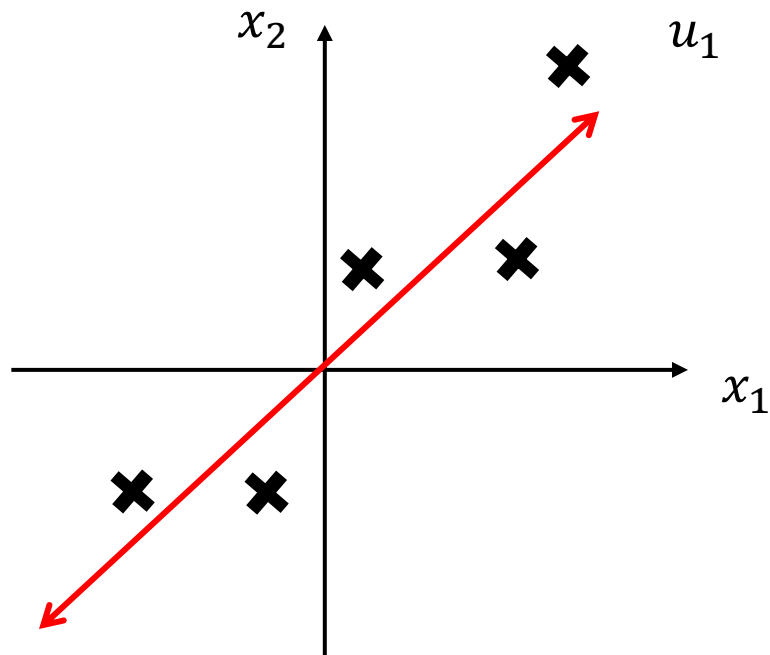
$$S = \begin{bmatrix} 9 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}$$

$$u_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad u_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 11 \quad \lambda_2 = 1$$

- Los eigenvectores son ortogonales ya que la matriz de covarianza es simétrica.
- Los eigenvectores indican la tendencia de los datos y su dispersión.

# Análisis de Componentes Principales



$$S = \begin{bmatrix} \text{Var}[X] & \text{Cov}(X, Y) \\ \text{Cov}(X, Y) & \text{Var}[Y] \end{bmatrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} 9 & 4 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}$$

$$u_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 11$$

$$A = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$Z = X \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Se elige el eigenvector de mayor magnitud (i.e., el que tenga mayor eigenvalor).
- Se hace la proyección en ese vector.



# Implementación Práctica de PCA

# ¿Cómo se elige $k$ ?

Error de proyección cuadrático medio:  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x^{(i)} - x_{approx}^{(i)}\|^2$

Variación total de la información:  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x^{(i)}\|^2$

Lo más común es elegir  $k$  lo más pequeño tal que

$$\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x^{(i)} - x_{approx}^{(i)}\|^2}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x^{(i)}\|^2} \leq \alpha$$

Lo cual nos dice que  $(1 - \alpha)\%$  de la varianza de los datos se retiene.

# ¿Cómo se elige $k$ ?

El algoritmo se vería así:

1. Intentar PCA con  $k = 1$ .
2. Determinar  $A, u_1, u_2, \dots, u_k, x_{approx}^{(1)}, \dots, x_{approx}^{(n)}$ .
3. Determinar si

$$\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x^{(i)} - x_{approx}\|^2}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|x^{(i)}\|^2} \leq \alpha$$

# Tarea

Una forma más *sencilla* de implementar PCA es mediante Descomposición en Valores Singulares (Singular Value Decomposition) de la matriz de covarianza: una matriz se puede representar como el producto de tres matrices U, S y V, donde S es una matriz diagonal. Investigar sobre el hecho de que, para elegir el valor de  $k$ , se tiene que elegir el más pequeño tal que

$$\frac{\sum_{i=1}^k S_{ii}}{\sum_{i=1}^n S_{ii}} \geq 1 - \alpha$$



# Aplicando PCA



# Uso Primordial – Reducción de Dimensionalidad

Si tenemos un conjunto de datos  $D = \{(x^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (x^{(n)}, y^{(n)})\}$ , donde  $x^{(i)} \in \mathbb{R}^p$  para  $p$  grande, se puede aplicar PCA para determinar nuevos  $z^{(1)}, \dots, z^{(n)} \in \mathbb{R}^k$ , con  $k < p$ . De tal manera que se tiene un nuevo conjunto  $D' = \{(z^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (z^{(n)}, y^{(n)})\}$ .

Después, se puede aplicar cualquier algoritmo de aprendizaje. El fin de aplicar esto es:

- Acelerar los algoritmos.
- Es **posible** prevenir overfitting (es mejor usar regularización).



# Uso Primordial – Reducción de Dimensionalidad

- Lo que hace PCA es determinar un mapeo  $x^{(i)} \rightarrow z^{(i)}$  (matriz  $A$ ) que se aplica únicamente con los datos del **conjunto de entrenamiento**.
- Una vez determinado dicho mapeo, es **deseable** aplicar el mismo a los datos del conjunto de prueba y/o validación.

# PCA no es un paso obligatorio

Diseño de un sistema de ML:

1. Obtener datos  $D = \{(x^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (x^{(n)}, y^{(n)})\}$ .
2. Aplicar PCA.
3. Entrenar un modelo con  $D' = \{(z^{(1)}, y^{(1)}), \dots, (z^{(n)}, y^{(n)})\}$ .
4. Evaluar en el conjunto de prueba.

Es buena idea probar con y sin PCA. Si no jala el sistema como se planea, puede ser buena idea recurrir a PCA.



¡Gracias!

Luis Zúñiga

luis.zuniga@correo.uia.mx