Análise de Componentes Principais

Demonstração passo a passo

Análise de Componentes Principais

Finalmente chegamos ao PCA. O que é isso?

É uma maneira de identificar padrões nos dados e expressá-los de maneira a destacar suas semelhanças e diferenças. Como os padrões de dados podem ser difíceis de encontrar em dados de alta dimensão, onde a representação gráfica (além do 3D) não está disponível, o PCA é uma ferramenta poderosa para analisar dados;

A outra principal vantagem do PCA é que, depois de encontrar esses padrões nos dados, e você os comprime, ou seja, pode reduzir o número de dimensões de cada amostra sem muita perda de informações;

Os próximos slides passarão pelas etapas necessárias para executar uma análise de componentes principais em um conjunto de dados. Tentaremos fornecer uma explicação do que está acontecendo em cada momento, para que você possa tomar decisões informadas ao tentar usar essa técnica.

Análise de Componentes Principais

Passo 1: Obter alguns dados

No nosso exemplo simples, vamos usar um conjunto de dados inventado. Ele tem apenas duas dimensões, e a razão pela qual eu escolhi isso é para fornecer gráficos dos dados para mostrar o que a análise PCA está fazendo em cada etapa. Os dados que usei são encontrados na Figura do próximo slide, junto com um gráfico desses dados.

Passo 2: Subtrair a média

Para que o PCA funcione corretamente, você deve subtrair a média de cada uma das dimensões de dados. A média subtraída é a média em cada dimensão. Portanto, todos os valores de x têm x_m (a média dos valores de x de todos os pontos de dados) subtraídos e todos os valores de y_m são subtraídos deles. Isso produz um conjunto de dados cuja média é zero. Na linguagem matemática, usamos x com um traço acima ao invés de x_m, como estabelecido nas figuras. Essa notação é opcional.

Análise de Componentes Principais

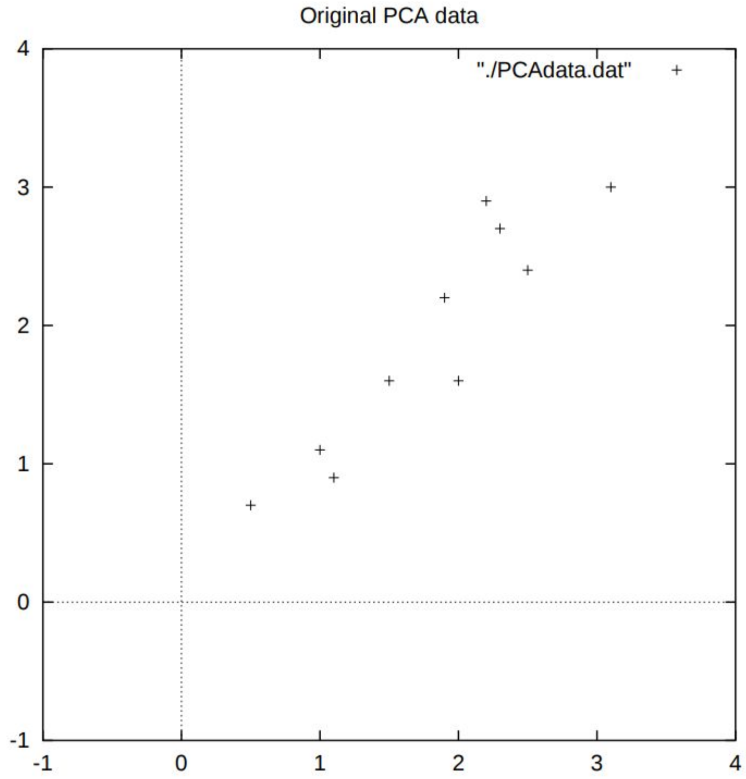
Aqui está nosso conjunto de dados:

Data =

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

DataAdjust =

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



Análise de Componentes Principais

Passo 3: Calcular a matriz de covariância:

Isso é feito exatamente da mesma maneira que discutimos nos slides anteriores. Como os dados são bidimensionais, a matriz de covariância será 2 por 2. Não há surpresas aqui, então eu apenas temos o resultado:

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

Portanto, como os elementos não diagonais nessa matriz de covariância são positivos, devemos esperar que as variáveis x e y aumentem juntas.

Passo 4: Calcular os autovetores e os autovalores da matriz de covariância:

Como a matriz de covariância é quadrada, podemos calcular os autovetores e os autovalores dessa matriz. Eles são bastante importantes, com informações úteis sobre nossos dados. Veremos o por que em breve.

Análise de Componentes Principais

Para não perdermos tempo, abaixo está o cálculo dos autovetores e autovalores:

$$eigenvalues = \begin{pmatrix} .0490833989 \\ 1.28402771 \end{pmatrix} \qquad eigenvectors = \begin{pmatrix} -.735178656 & -.677873399 \\ .677873399 & -.735178656 \end{pmatrix}$$

É importante notar que esses autovetores são ambos unitários, ou seja. os comprimentos são ambos 1. Isso é muito importante para o PCA, mas, felizmente, a maioria dos pacotes de matemática, quando solicitados por autovetores, fornecerão autovetores unitários.

Então, o que eles significam?

Se você observar o gráfico dos dados na Figura 3.2, poderá ver como os dados têm um padrão bastante forte. Como esperado da matriz de covariância, essas duas variáveis realmente aumentam juntas. No topo dos dados, plotei os vetores próprios também. Eles aparecem como linhas pontilhadas na diagonal na plotagem. Conforme indicado na seção do vetor próprio, eles são perpendiculares um ao outro. Mas, mais importante, eles nos fornecem informações sobre os padrões nos dados. Veja como um dos vetores próprios passa pelo meio dos pontos, como desenhar uma linha de melhor ajuste? Esse vetor próprio

Análise de Componentes Principais

Se observarmos o gráfico dos dados, ficará claro como os dados têm um padrão bastante forte. Como esperado da matriz de covariância, essas duas variáveis realmente aumentam juntas.

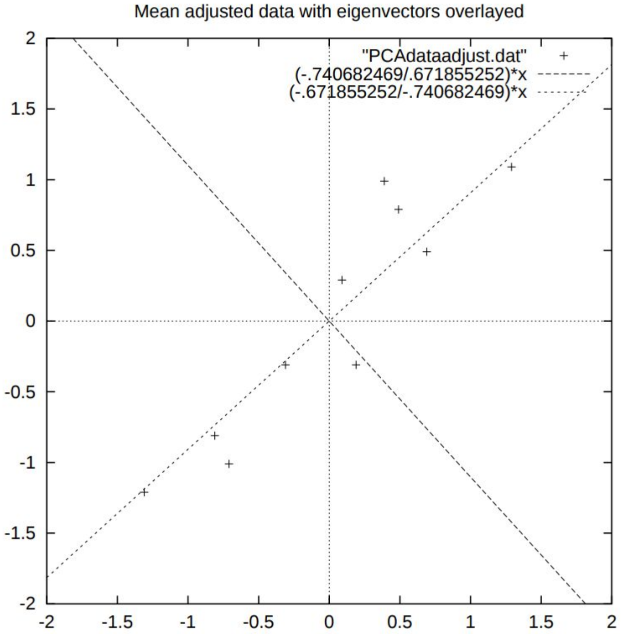


Figure 3.2: A plot of the normalised data (mean subtracted) with the eigenvectors of the covariance matrix overlayed on top.

Análise de Componentes Principais

No topo dos dados, estão plotados os autovetores, aparecem como linhas pontilhadas na diagonal na plotagem. Conforme indicado na explicação sobre autovetor, eles são perpendiculares um ao outro. Mas, mais importante, eles nos fornecem informações sobre os padrões nos dados. Veja como um dos autovetores passa pelo meio dos pontos, como se desenhássemos uma linha de melhor ajuste.

Esse autovetor está nos mostrando como esses dois conjuntos de dados estão relacionados nessa linha. O segundo autovetor nos fornece o outro padrão, menos importante nos dados, e mostra que todos os pontos seguem a tendência da linha principal, mas estão fora da linha em alguma medida. Assim, por esse processo de obtenção dos autovetores da matriz de covariância, conseguimos extrair linhas que caracterizam os dados.

O restante das etapas envolve a transformação dos dados para que sejam expressos em termos dessas linhas.

Análise de Componentes Principais

Passo 5: escolhendo componentes e formando os novos vetores de características

Aqui é onde entra a noção de compactação de dados e dimensionalidade reduzida. Se você observar, notará que os autovalores são bastante diferentes e que que o autovetor com o maior autovalor é o componente principal do conjunto de dados. No nosso exemplo, o autovetor com o autovalor maior foi o que apontou a aproximadamente 45º. Esse é o relacionamento mais significativo entre as dimensões dos dados. Em geral, uma vez que os autovetores são encontrados, o próximo passo é ordená-los por autovalor, do maior para o menor. Isso fornece os componentes em ordem de importância.

Agora, geralmente ignora-se os componentes de menor importância. Você perde algumas informações, mas se os autovalores forem pequenos, não perderá muito. Se você deixar de fora alguns componentes, o conjunto final de dados terá menos dimensões que o original.

O que precisa ser feito agora é que você precisa formar um vetor de características, que é apenas um nome sofisticado para uma matriz de vetores. Isso é construído usando os autovetores que você deseja manter da lista de autovetores.

Análise de Componentes Principais

Dado o nosso exemplo de conjunto de dados e o fato de termos 2 autovetores, temos duas opções. Podemos formar um vetor de características com os dois vetores próprios:

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

ou, podemos optar por deixar de fora o componente menor e menos significativo e ter apenas uma coluna:

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

Análise de Componentes Principais

Passo 6: Derivando o novo conjunto de dados

Essa é a etapa final do PCA e também é a mais fácil. Depois de escolhermos os componentes (autovetores) que desejamos manter em nossos dados e formarmos um vetor de característica, simplesmente pegamos a transposição do vetor e multiplicamos à esquerda do conjunto de dados original, transposto.

$$FinalData = RawFeatureVector \times RawDataAdjust$$

onde *RawFeatureVector* é a matriz com os autovetores nas colunas transpostas para que os autovetores estejam agora nas linhas, com o autovetor mais significativo no topo, e *RawDataAdjust* são os dados ajustados à média, e transpostos, ie. os dados os itens estão em cada coluna, com cada linha mantendo uma dimensão separada.

Análise de Componentes Principais

FinalData é o conjunto de dados final, com itens de dados em colunas e dimensões ao longo das linhas. Nosso conjunto de dados original tinha dois eixos, x e y, portanto, nossos dados estavam em termos deles. É possível expressar dados em termos dos novos dois eixos.

A transformação é pegar apenas o autovetor com o maior autovalor. A tabela de dados resultante disso é encontrada na Figura do próximo slide Aqui eu fiz o cálculo das duas dimensões somente para eleito de explicação, mas numa aplicação real, ele possui apenas uma dimensão. Se você comparar esse conjunto de dados com o resultante do uso dos dois autovetores, notará que esse conjunto de dados é exatamente a primeira coluna do outro.

Então, o que fizemos aqui? Basicamente, transformamos nossos dados para que sejam expressos em termos dos padrões entre eles, que são as linhas que melhor descrevem os relacionamentos entre os dados. Isso é útil porque agora classificamos nossos pontos de dados como uma combinação das contribuições de cada uma dessas linhas. Inicialmente, tínhamos os eixos x e y, mas os valores x e y não nos diziam exatamente como cada ponto se relaciona com o restante dos dados.

Agora, os valores dos pontos de dados nos dizem exatamente onde (ou seja, acima / abaixo) as linhas de tendência em que os pontos de dados estão.

Análise de Componentes Principais

Final:

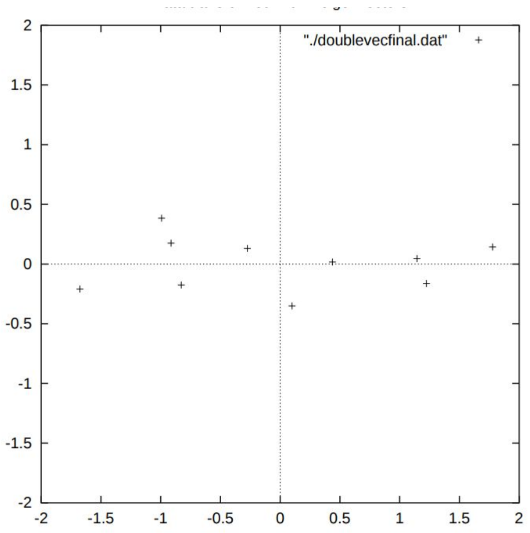


Figure 3.3: The table of data by applying the PCA analysis using both eigenvectors, and a plot of the new data points.

Transformed Data=

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