PCA

Principal Component Analysis
Análise dos Componentes Principais

Prof. Frederico Coelho.

(Baseado no livro de Antônio de Pádua Braga e
No material da UFOP)

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.

Extrator de características (representação)

PCA

A análise de componentes principais (PCA) é uma técnica que pode ser usada para simplificar um conjunto de dados

• É uma transformação linear que escolhe um novo sistema de coordenadas para o conjunto de dados, de modo que a maior variação por qualquer projeção do conjunto de dados fique no primeiro eixo (então chamado de primeiro componente principal), a segunda maior variação no segundo eixo, e assim por diante.

• O PCA pode ser usado para reduzir a dimensionalidade, eliminando os componentes principais posteriores.

PCA – Exemplo simples

Considere os seguintes pontos de três dimenções:

1	2	4	3	5	6
2	4	8	6	10	12
3	6	12	9	15	18

Precisamos de 18 bytes para armazenar esta informação (3 x 6)

PCA – Exemplo simples

Mas olhando com mais calma podemos perceber que estes vetores são geometricamente relacionados:

$$\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix} = 1 * \begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}2\\4\\6\end{bmatrix} = 2 * \begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}4\\8\\12\end{bmatrix} = 4 * \begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}3\\6\\9\end{bmatrix} = 3 * \begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}5\\10\\15\end{bmatrix} = 5 * \begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix}6\\12\\18\end{bmatrix} = 6 * \begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}$$

PCA – Exemplo simples

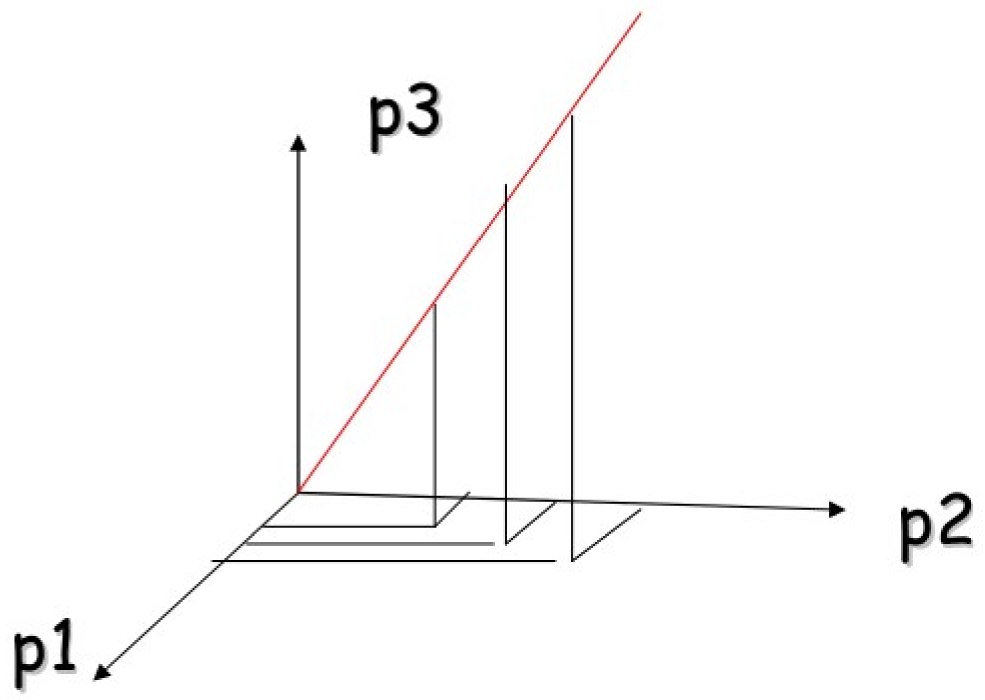
Agora precisamos apenas de 9 bytes para armazenar estes dados
3 para o vetor e 6 para as constantes.

$$\begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix} = 1 * \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}2\\4\\6\end{pmatrix} = 2 * \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}4\\8\\12\end{pmatrix} = 4 * \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}3\\6\\9\end{pmatrix} = 3 * \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}5\\10\\15\end{pmatrix} = 5 * \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}6\\12\\18\end{pmatrix} = 6 * \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}$$

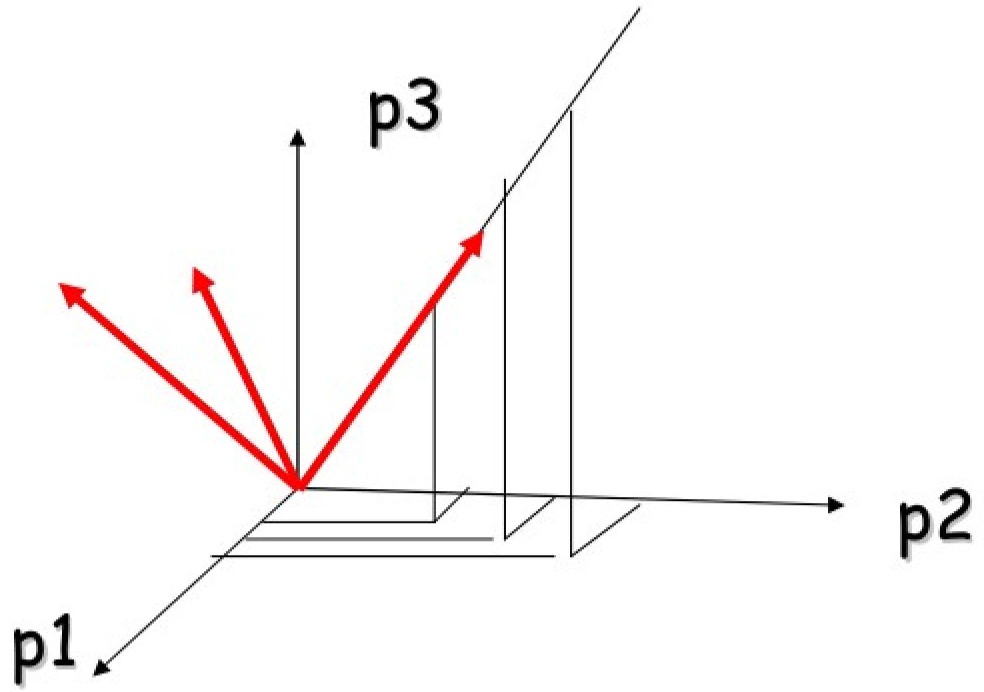
PCA – Exemplo simples

Geometricamente estes pontos pertencem a uma única reta no espaço 3D



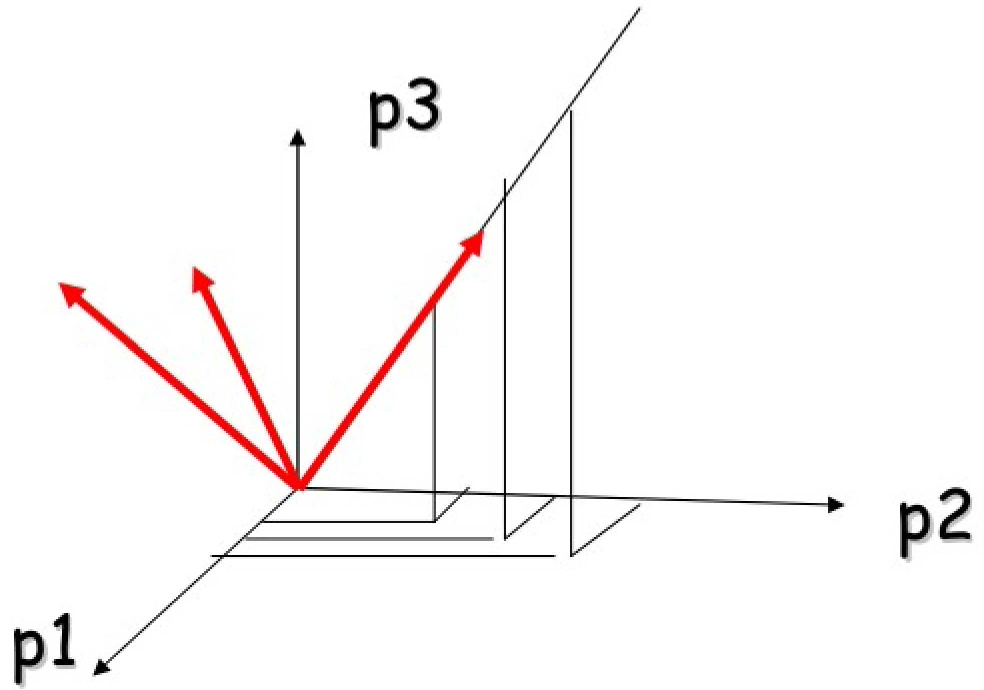
PCA – Exemplo simples

Podemos encontrar um novo sistema de coordenadas de forma que uma
Delas esteja exatamente na direção da reta



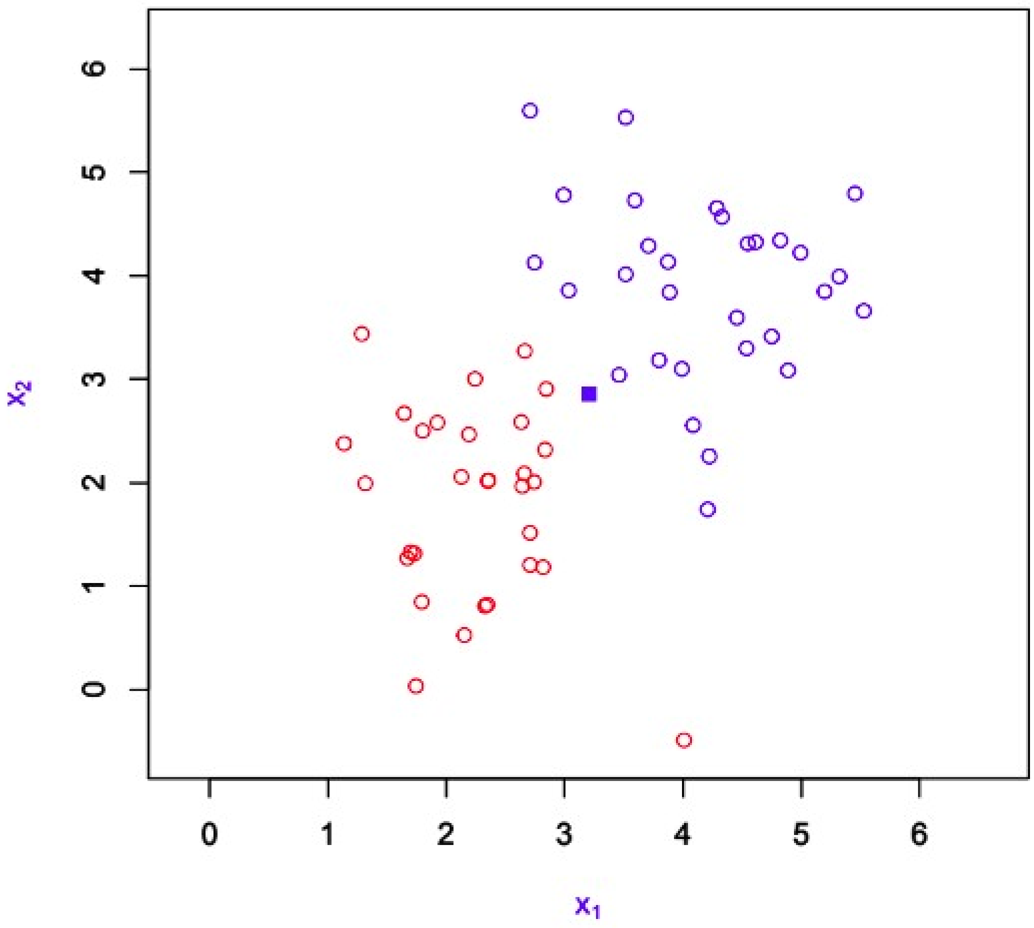
PCA – Exemplo simples

Neste novo sistema as amostras tem apenas uma coordenada não nula.
Apenas precisamos armazenar esta direção e suas coordenadas.



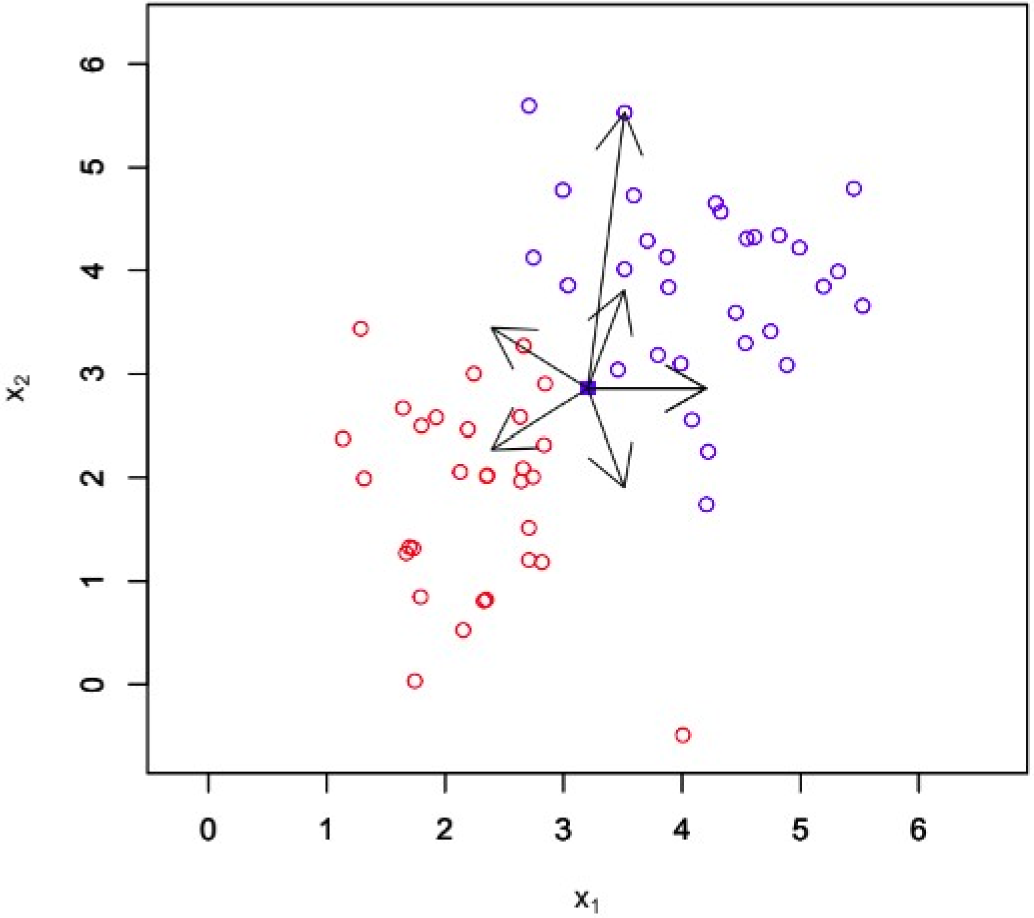
PCA

Centralizar amostras



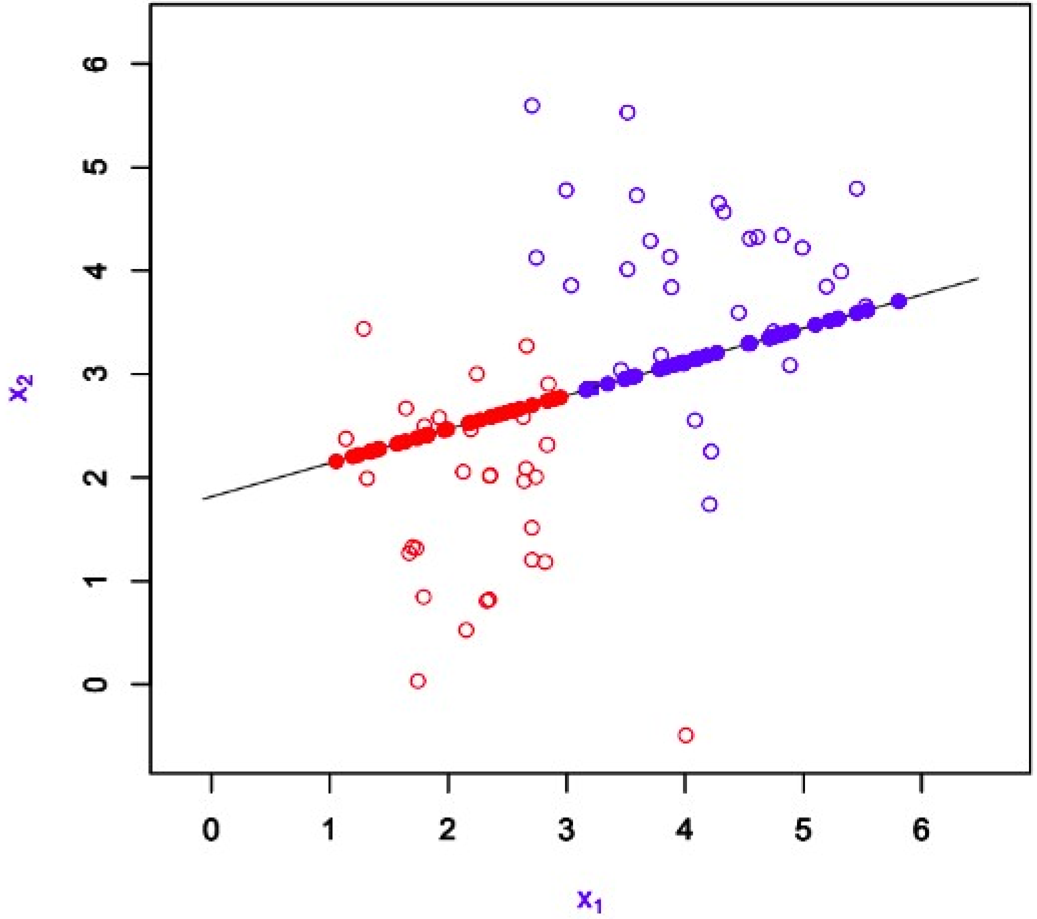
PCA

Direções arbitrárias de possíveis retas passando pela nova origem



PCA

Projeções em uma reta de direção arbitrária



Queremos encontrar
A direção que maximiza
estas projeções

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.
  - Nem todas as matrizes possuem autovetores.
  - Para uma dada *n* x *n* matriz, existem *n* 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.

Definições

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

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

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

Calculando Autovalores e Autovetores

- Pode-se reescrever a condição:

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

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 $(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{\lambda} \boldsymbol{I})$ tiver uma inversa, então

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

$$\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

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

Calculando
Autovalores e Autovetores

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

$$p(\boldsymbol{\lambda}) = \det\,(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{\lambda}\, \boldsymbol{I})$$

de **polinômio característico** de $\boldsymbol{A}$.

- Os autovalores de $\boldsymbol{A}$ são as raízes do polinômio característico de $\boldsymbol{A}$.

Calculando Autovalores e Autovetores

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

correspondente à um autovalor $\boldsymbol{\lambda}_\mathbf{i}$, basta resolver o sistema linear de equações dado por

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

PCA Tutorial

- 1) Escolha um conjunto de dados.
- 2) Normalize esses dados, subtraindo-os da média.

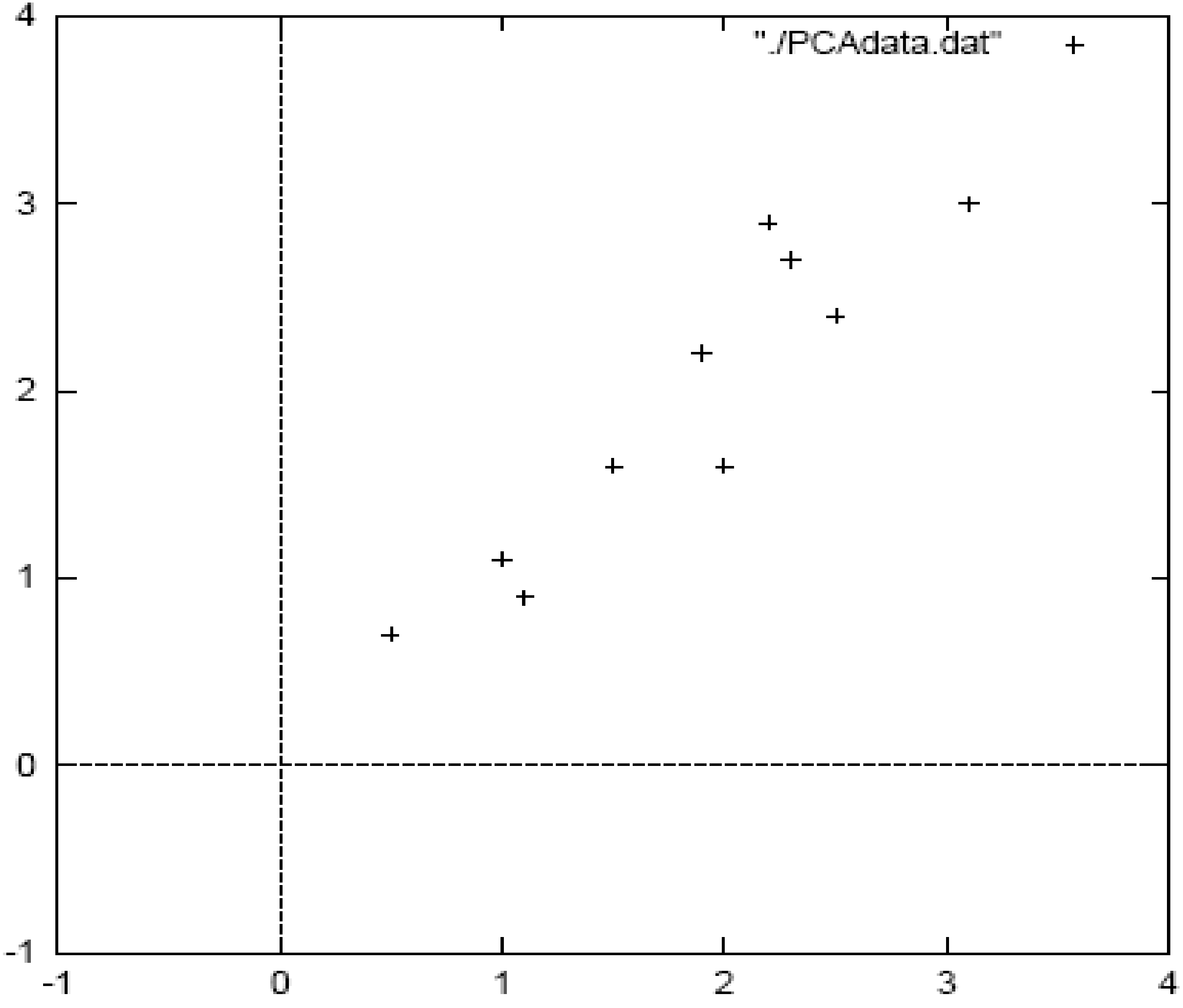
Dados

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 Normalizados

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



PCA Tutorial

- 3) Calcule a matriz de correlação 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

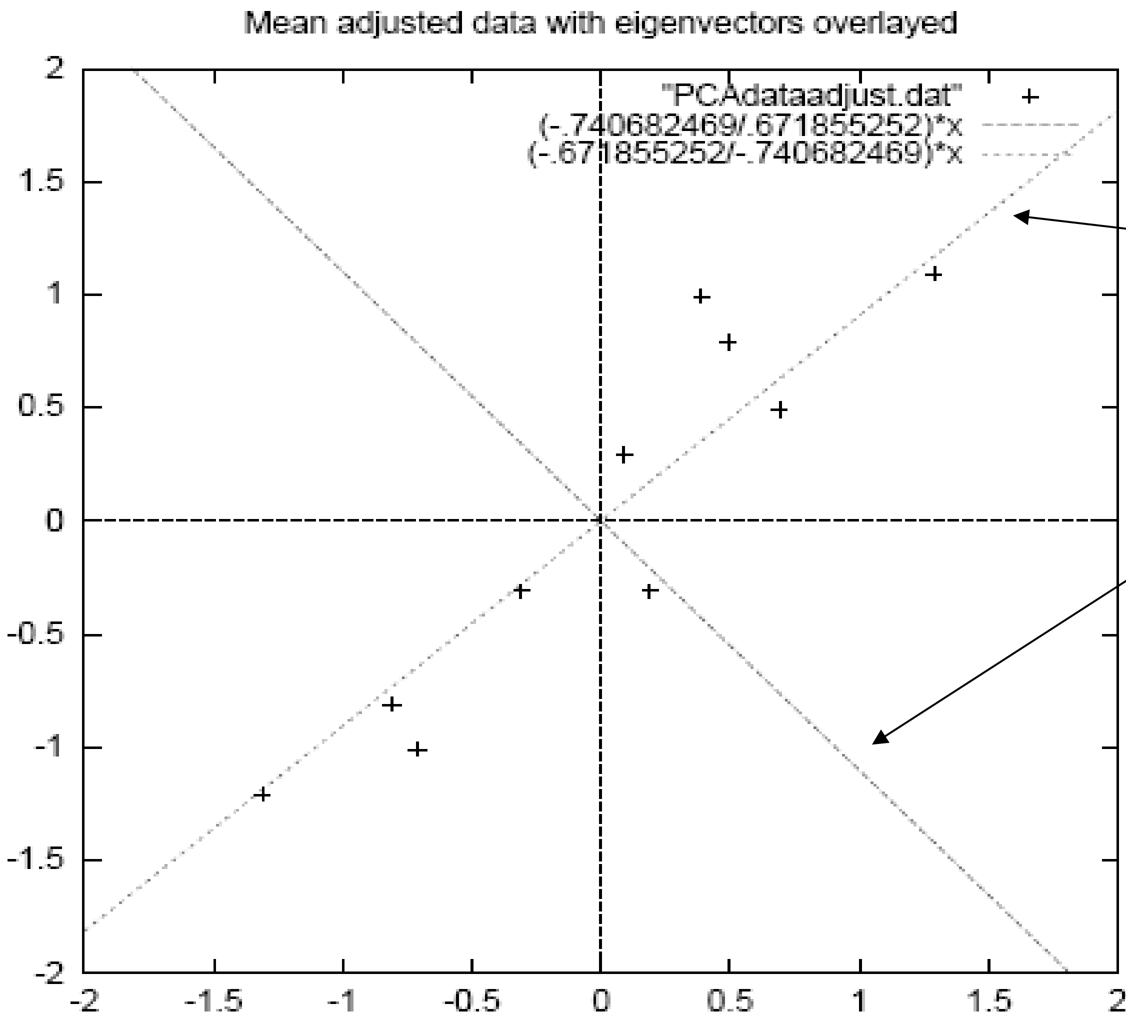
- 4) Encontre os autovetores e autovalores para a matriz de covariância.
  - Uma vez que a matriz de covariância é quadrada podemos encontrar os autovetores e autovalores.

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

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

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.

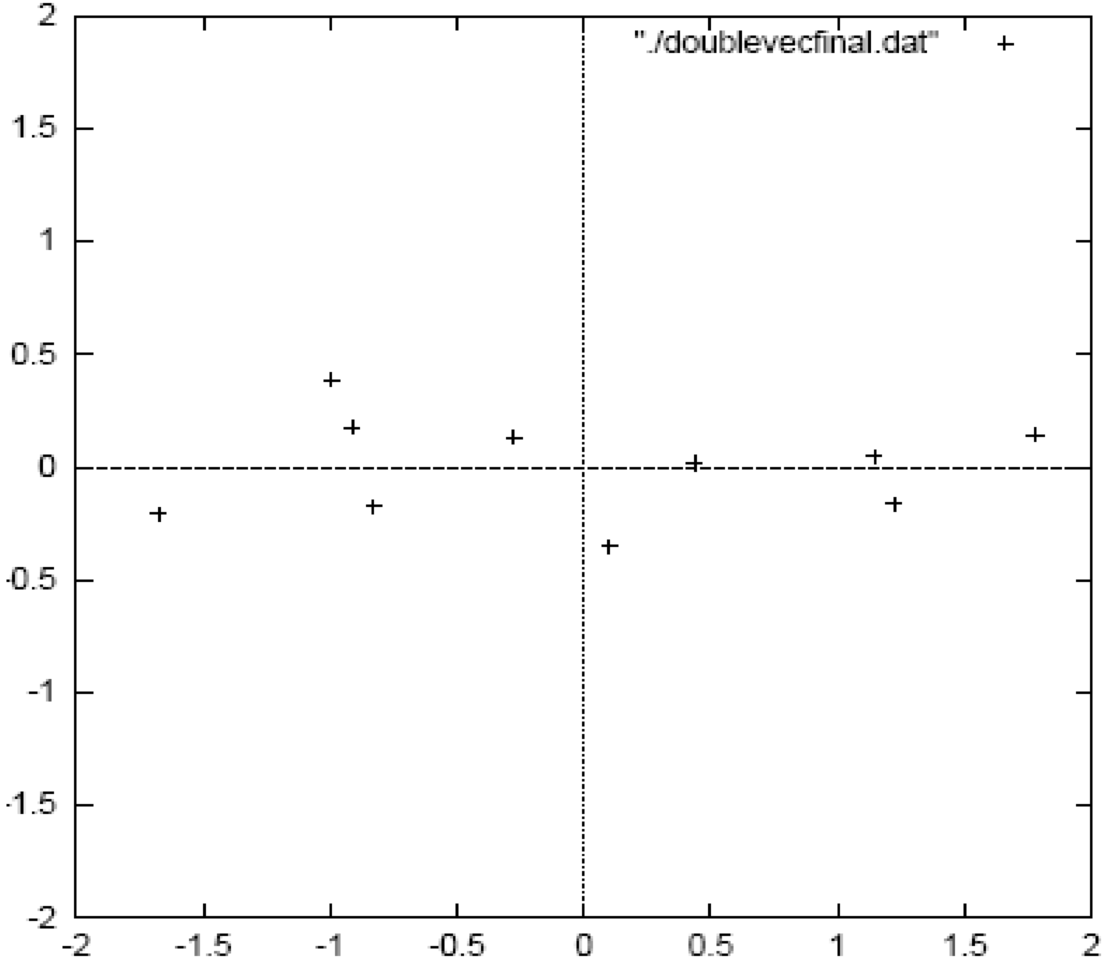
PCA Tutorial

- 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.

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



Algoritmo 2 Algoritmo para implementação da análise de componentes principais.

função MEUPCA($\mathbf{X}$)
    Entrada: $\mathbf{X}$
    Saída: λ_i, $\mathbf{u}_i$
    calcule o vetor médio $\mathbf{x}_m$ de $\mathbf{X}$
    $\mathbf{X}' \leftarrow (\mathbf{X} - \mathbf{x}_m)$
    $\mathbf{S} \leftarrow$ covariância($\mathbf{X}'$)
    decomponha $\mathbf{S}$ em seus autovetores e autovalores
    $\mathbf{u}_i$ recebe autovetores de $\mathbf{S}$
    λ_i recebe autovalores de $\mathbf{S}$
    Retorna $\mathbf{u}_i$ e λ_i
fim função