Redes Neurais e Deep Learning

Aula 03 – Principal Components Analysis (PCA)

Prof. Érick T. Yamamoto

FIAP GRADUAÇÃO

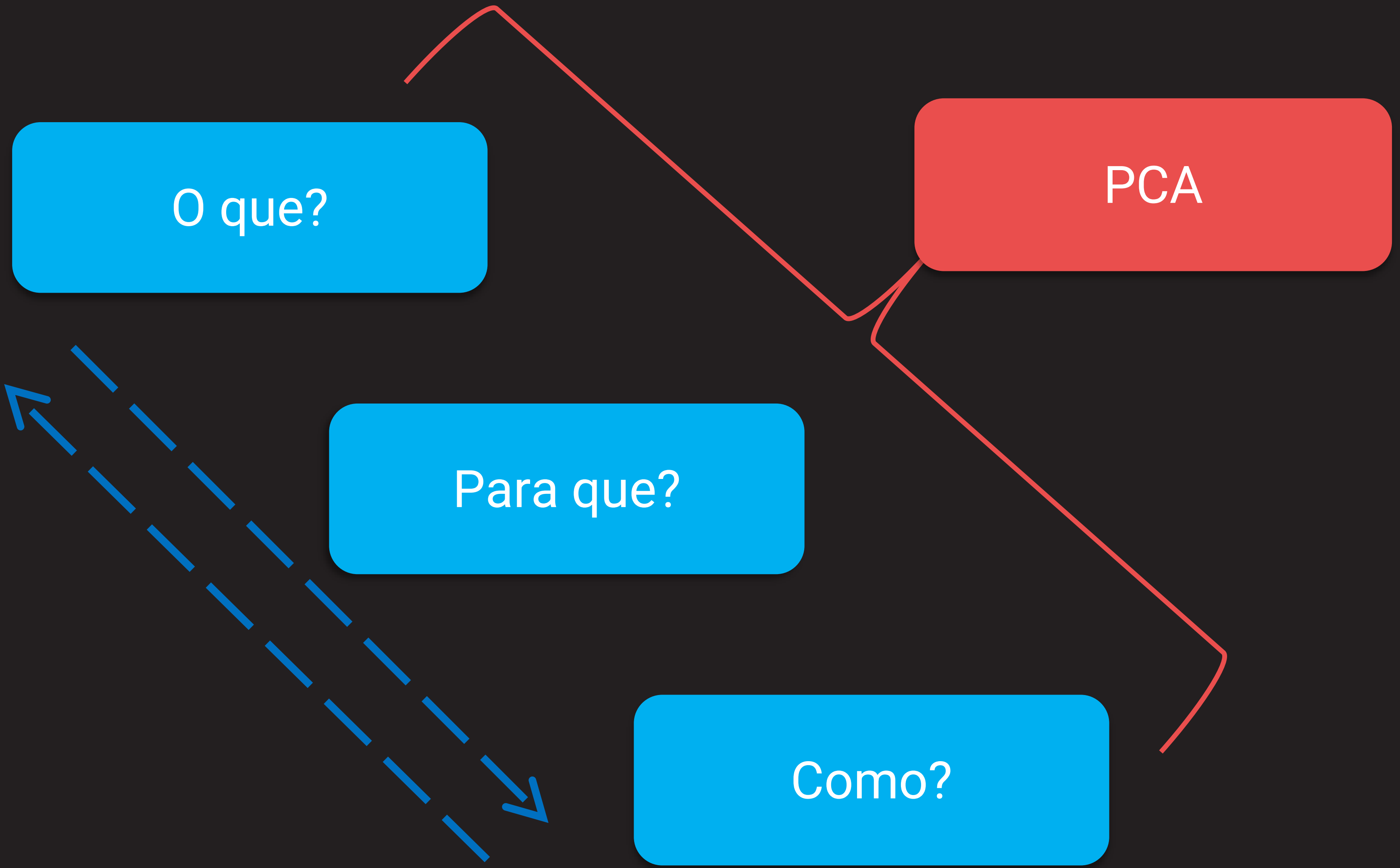
Motivação

A Análise de Componentes Principais (PCA) é uma técnica estatística amplamente utilizada para simplificar conjuntos de dados complexos, especialmente aqueles com muitas variáveis correlacionadas. A motivação para o uso do PCA inclui:

- **Redução da Dimensionalidade:** Ao transformar variáveis correlacionadas em um conjunto menor de componentes principais não correlacionados, o PCA facilita a visualização e análise dos dados, mantendo a maior parte da variância original;
- **Eliminação da Multicolinearidade:** O PCA aborda a multicolinearidade transformando variáveis correlacionadas em componentes independentes, melhorando a performance de modelos estatísticos;
- **Visualização de Dados Complexos:** Projetando dados multidimensionais em espaços de menor dimensão, o PCA permite identificar padrões, tendências e outliers que seriam difíceis de detectar em altas dimensões;
- **Pré-processamento para Aprendizado de Máquina:** Ao reduzir a dimensionalidade e eliminar redundâncias, o PCA diminui a complexidade dos modelos de aprendizado de máquina, mitigando problemas como o sobreajuste e a "maldição da dimensionalidade".

Em resumo, o PCA é uma ferramenta poderosa para tornar conjuntos de dados complexos mais manejáveis e informativos, facilitando análises mais eficazes e eficientes.

O que é necessário para entender o PCA?



O “O que” e “Para que” já vimos na Motivação. Mas Como funciona?

Como visto em Matemáticas para Redes Neurais, precisamos de alguns elementos fundamentais para nos auxiliar no entendimento:

- Variância: Mede o quanto os dados se dispersam em relação à média;
- Covariância: Indica o grau de variação conjunta entre duas variáveis;
- Autovalores e Autovetores: Associados a matrizes quadradas, são fundamentais para determinar as direções principais (componentes) nos dados.

Estatística

A mudança entre variáveis

Mas Como funciona a Variância?

Variância: a **variância** mede o grau de dispersão dos dados em torno da média. Para uma variável X com n observações, a variância σ^2 é calculada como:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$$

Onde:

→ x_i são os valores individuais da variável;

→ $\bar{x}$ é a média dos valores de X.

Mas Como funciona a Covariância?

Covariância: A covariância indica o grau de variação conjunta entre duas variáveis. Para duas variáveis X e Y, a covariância $cov(X, Y)$ é dada por:

$$cov(X, Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} (x_i - \bar{x})\,(y_i - \bar{y}) \leftarrow \text{Populacional}$$

$$cov(X, Y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=0}^{n-1} (x_i - \bar{x})\,(y_i - \bar{y}) \leftarrow \text{Amostral}$$

Onde:

→ x_i são os valores individuais da variável X;

→ $\bar{x}$ é a média dos valores de X;

→ y_i são os valores individuais da variável Y;

→ $\bar{y}$ é a média dos valores de Y.

Importância da Correção de Bessel: Ao utilizar uma amostra para estimar a covariância, a média amostral ($\bar{X}$ e $\bar{Y}$) pode não corresponder exatamente às médias populacionais (μ_X e μ_Y). Dividir por n−1 em vez de n compensa essa potencial subestimação da variabilidade, proporcionando uma estimativa mais precisa da covariância populacional.

Mas Como funciona a Covariância?

A covariância mede o grau de interdependência entre duas variáveis aleatórias, indicando como as variações de uma influenciam as variações da outra. Para duas variáveis X e Y, a covariância é calculada como:

$$cov(X,Y) = \mathrm{E}[(X - \mathrm{E(X)})(\mathrm{Y} - \mathrm{E(Y)})]$$

Onde:

→ *E é denotado como Esperança ou valor esperado.*

Expandindo esse conceito para um conjunto de n variáveis aleatórias, a matriz de covariância é uma matriz n×n que generaliza a covariância para múltiplas dimensões. Cada elemento (i,j) dessa matriz representa a covariância entre as variáveis Xi e Xj:

$$\sum_{ij} = cov(X_i, Y_j) = \mathrm{E}[(X_i - \mathrm{E(X_i)})(\mathrm{Y_j} - \mathrm{E(Y_j)})]$$

Mas Como funciona a Matriz de Covariância?

A matriz de covariância é simétrica, com as variâncias das variáveis na diagonal principal e as covariâncias fora da diagonal. Ela é fundamental em diversas áreas, como estatística multivariada e análise de componentes principais (PCA), pois captura a estrutura de dependência e é representada por C. Supondo que tenhamos 3 variáveis x, y e z, a matriz de covariância ficará da seguinte maneira:

$$C = \begin{pmatrix} conv(x,x) & conv(y,x) & conv(z,x) \\ conv(x,y) & conv(y,y) & conv(z,y) \\ conv(x,z) & conv(y,z) & conv(z,z) \end{pmatrix}$$

Mas Como funciona a Matriz de Covariância?

Esta matriz pode ser construído também, através da seguinte relação:

$$C = \frac{1}{n-1} B^T * B$$

Onde:

→ B é a matriz os dados são centralizados, definido por: $B = \begin{pmatrix} x_1 - \overline{x_1} & \cdots & x_n - \overline{x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_m - \overline{x_1} & \cdots & x_m - \overline{x_n} \end{pmatrix}$;

→ n é o número de observações (linhas ou quantidade de amostras) e;

→ B^T é a transposta da matriz B.

Vamos colocar na prática!

Suponha que temos um conjunto de dados referente a três variáveis: Altura (em metros), Peso (em kg) e Idade (em anos) de cinco indivíduos. Construa a matriz de covariância e encontre as variâncias das três a variáveis. Os dados são apresentados na tabela abaixo:

Indivíduo	Altura (X_1)	Peso (X_2)	Idade (X_3)
1	1,7	65	25
2	1,85	72	32
3	1,78	68	28
4	1,8	70	30
5	1,75	66	27

Resolução

Passo 1: Calcular as Médias de Cada Variável;

Passo 2: Centralizar os Dados (Subtrair as Médias);

Passo 3: Construir a Matriz de Dados Centralizados (B);

Passo 4: Calcular a Matriz de Covariância (C);

Passo 5: Interpretação da Matriz de Covariância.

Álgebra Linear

Transformações lineares afetam direções específicas em um espaço vetorial.

Mas Como funciona o Autovetores e Autovalores?

Os autovalores e autovetores são conceitos fundamentais na álgebra linear, especialmente no contexto do PCA. Para uma matriz quadrada A, um autovalor λ e um autovetor v satisfazem a equação:

$$Av = \lambda v$$

No contexto do PCA, A é a matriz de covariância C. Os autovetores determinam as direções dos componentes principais, enquanto os autovalores indicam a magnitude da variância em cada uma dessas direções.

Mas Como funciona o Autovetores e Autovalores?

Em **Álgebra Linear**, os conceitos de **autovalores** e **autovetores** são fundamentais para entender como certas transformações lineares afetam vetores em um espaço vetorial.

Definição Formal:

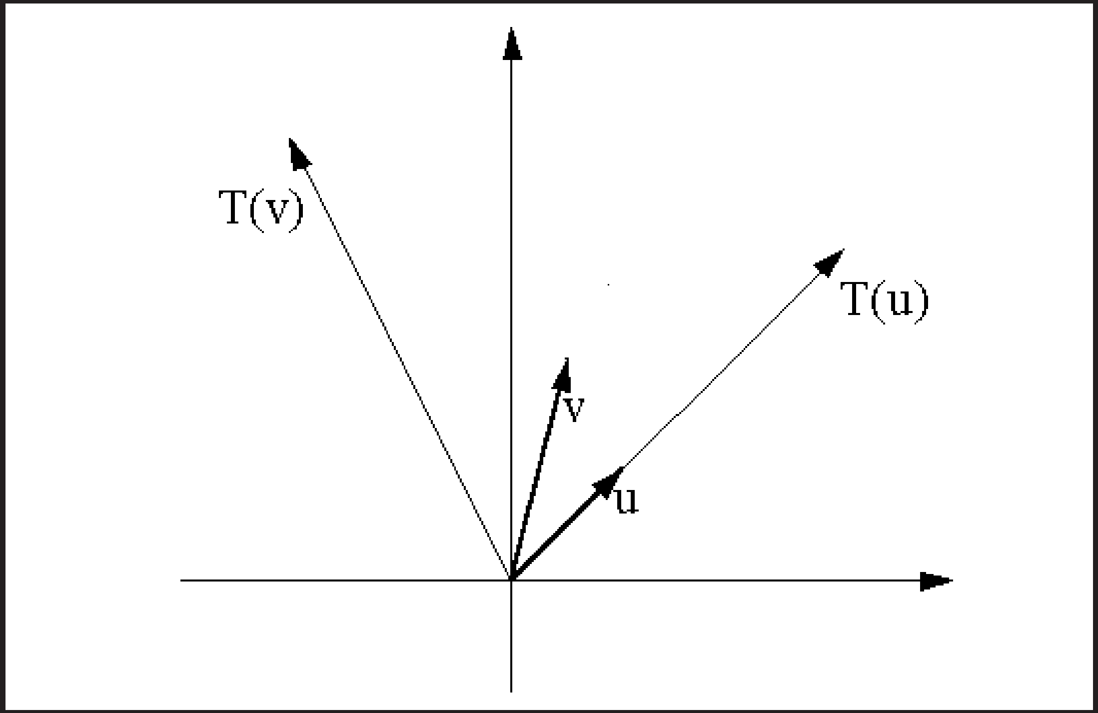
→Autovetor: Dado um operador linear A que atua em um espaço vetorial V, um vetor não nulo v é chamado de autovetor de A se, ao ser transformado por A, o resultado é um múltiplo escalar de v. Matematicamente, isso é expresso como: $Av=\lambda v$ onde λ é um escalar;

→Autovalor: O escalar λ na equação acima é denominado autovalor correspondente ao autovetor v.

Mas Como funciona o Autovetores e Autovalores?

Interpretação Geométrica:

Geometricamente, os autovetores de uma transformação linear A são direções no espaço que, quando A é aplicada, não são alteradas, exceto possivelmente em magnitude e sentido. O autovalor associado indica o fator pelo qual o autovetor é escalado durante a transformação.



Se quiserem ver essa interpretação podem utilizar o seguinte link: https://www.geogebra.org/m/abkykjmm
(Desenvolvido no app geogebra pela IGM)

Mas Como funciona o Autovetores e Autovalores?

Como calculamos os autovetores e autovalores?

Primeiro, temos que interpretar a equação apresentada:

$$Av = \lambda v$$

Onde para uma matriz A, um vetor não nulo v é chamado de autovetor se, ao ser multiplicado por A, o resultado é o próprio vetor escalado por um valor escalar λ (autovalor).

Rearranjando a equação, obtemos:

$$Av - \lambda v = 0$$

Mas Como funciona o Autovetores e Autovalores?

Como calculamos os autovetores e autovalores?

Primeiro, temos que interpretar a equação apresentada:

$$Av = \lambda v$$

Onde para uma matriz A, um vetor não nulo v é chamado de autovetor se, ao ser multiplicado por A, o resultado é o próprio vetor escalado por um valor escalar λ (autovalor).

Rearranjando a equação, obtemos:

$$Av - \lambda v = 0$$

Mas Como funciona o Autovetores e Autovalores?

Como calculamos os autovetores e autovalores?

Rearranjando novamente a equação, obtemos:

$$(A - \lambda I)v = 0$$

Aqui, I é a matriz identidade de mesma dimensão que A. E para que essa equação homogênea possua soluções não triviais (ou seja, **vetores v não nulos**), o determinante da matriz coeficiente deve ser zero:

$$det(A - \lambda I) = 0$$

Portanto, esta é chamada de **equação característica**. As soluções para **λ** que satisfazem essa equação são os autovalores da matriz **A**.

Vamos colocar na prática!

Exemplo 1: Considere a matriz $A = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$. Determine os autovalores e autovetores de A.

Vamos colocar na prática!

Exemplo 2: Com a matriz de covariância abaixo, determine os autovetores e autovalores de C.

$$C = \begin{pmatrix} 0{,}00293 & 0{,}153 & 0{,}163 \\ 0{,}153 & 9{,}7 & 10{,}3 \\ 0{,}163 & 10{,}3 & 10{,}8 \end{pmatrix}$$

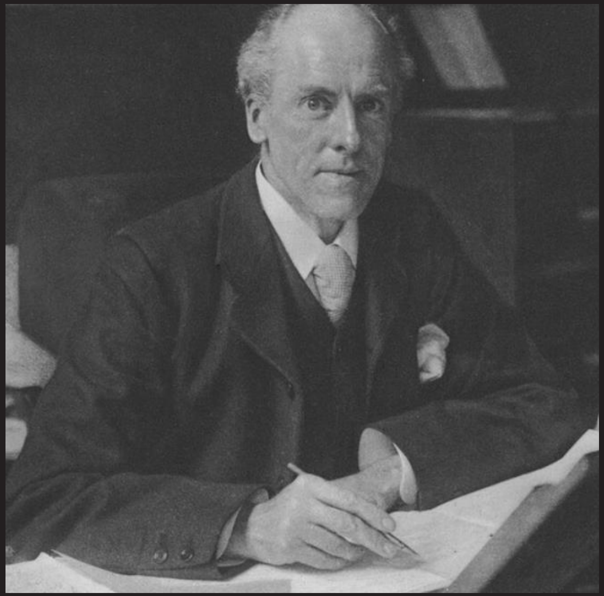
Principal Component Analysis (PCA)

A técnica de redução de dimensionalidade.

Chegamos na parte que nos interessa!

A técnica estatística utilizada para reduzir a dimensionalidade de conjuntos de dados, transformando variáveis correlacionadas em um conjunto de variáveis ortogonais chamadas de componentes principais, facilitando a visualização e a análise dos dados.

Karl Pearson é creditado pelo desenvolvimento da PCA em 1901.



Como funciona o PCA na nossa realidade? Existe passos a serem seguidos?

Passos para desenvolver o PCA

Sim, é possível seguintes os seguintes passos:

→ Passo 1: Padronizar o conjunto de dados;

→ Passo 2: Calcule a matriz de covariância para os recursos no conjunto de dados;

→ Passo 3: Calcule os autovalores e autovetores para a matriz de covariância;

→ Passo 4: Classifique os autovalores e seus autovetores correspondentes;

→ Passo 5: Escolha k autovalores e forme uma matriz de autovetores;

→ Passo 6: Transforme a matriz original.

Passo 1: Padronizar o conjunto de dados

Suponha que temos o conjunto de dados abaixo, que tem 4 recursos e um total de 5 exemplos de treinamento.

F1	F2	F3	F4
1	2	3	4
5	5	6	7
1	4	2	3
5	3	2	1
8	1	2	2

Passo 1: Padronizar o conjunto de dados

Iremos padronizar o conjunto de dados e, para isso, precisamos calcular a média e o desvio padrão para cada característica.

$$x_{novo} = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

F1	F2	F3	F4
1	2	3	4
5	5	6	7
1	4	2	3
5	3	2	1
8	1	2	2

Passo 1: Padronizar o conjunto de dados

Iremos padronizar o conjunto de dados e, para isso, precisamos calcular a média e o desvio padrão para cada característica.

$$x_{novo} = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

Estátistica Aplicada	F1	F2	F3	F4
μ	4	3	3	3.4
σ	3	1.58114	1.73205	2.30217

Passo 1: Padronizar o conjunto de dados

Aplicando a fórmula, cada característica no conjunto de dados é transformada conforme abaixo

$$F1_{novo} = \frac{F_1 - 4}{3} \quad F2_{novo} = \frac{F_2 - 3}{1.58114} \quad F3_{novo} = \frac{F_3 - 3}{1.73205} \quad F4_{novo} = \frac{F_4 - 3.4}{2.30217}$$

F1	F2	F3	F4
1	2	3	4
5	5	6	7
1	4	2	3
5	3	2	1
8	1	2	2

Passo 1: Padronizar o conjunto de dados

Aplicando a fórmula, cada característica no conjunto de dados é transformada conforme abaixo

F1	F2	F3	F4
-1	-0.63246	0	0.26062
0.33333	1.26491	1.73205	1.56374
-1	0.63246	-0.57735	-0.17375
0.33333	0	-0.57735	-1.04249
1.33333	-1.26491	-0.57735	-0.60812

$$F1_{novo} = \frac{F_1 - 4}{3} \quad F2_{novo} = \frac{F_2 - 3}{1.58114} \quad F3_{novo} = \frac{F_3 - 3}{1.73205} \quad F4_{novo} = \frac{F_4 - 3.4}{2.30217}$$

Passo 2: Calcule a matriz de covariância para os recursos no conjunto de dados

Aplicando a fórmula, cada característica no conjunto de dados é transformada conforme abaixo

	F1	F2	F3	F4
F1	var(F1)	cov(F1,F2)	cov(F1,F3)	cov(F1,F4)
F2	cov(F2,F1)	var(F2)	cov(F2,F3)	cov(F2,F4)
F3	cov(F3,F1)	cov(F3,F2)	var(F3)	cov(F3,F2)
F4	cov(F4,F1)	cov(F4,F2)	cov(F4,F2)	var(F4)

Passo 2: Calcule a matriz de covariância para os recursos no conjunto de dados

Aplicando a fórmula, cada característica no conjunto de dados é transformada conforme abaixo

	F1	F2	F3	F4
F1	0.8	-0.25298	0.03849	-0.14479
F2	-0.25298	0.8	0.51121	0.4945
F3	0.03849	0.51121	0.8	0.75236
F4	-0.14479	0.4945	0.75236	0.8

Passo 3: Calcule os autovalores e autovetores para a matriz de covariância

$$Av = \lambda v \text{ e } det(A - \lambda I) = 0$$

Como já sabemos que v é um vetor diferente de zero, então ao aplicarmos na matriz C, temos:

	F1	F2	F3	F4
F1	0.8 - λ	-0.25298	0.03849	-0.14479
F2	-0.25298	0.8 - λ	0.51121	0.4945
F3	0.03849	0.51121	0.8 - λ	0.75236
F4	-0.14479	0.4945	0.75236	0.8 - λ

Resolvendo a equação acima = 0 → λ = 2,51579324, 1,0652885, 0,39388704, 0,02503121

Passo 3: Calcule os autovalores e autovetores para a matriz de covariância

$$Av = \lambda v \text{ e } det(A - \lambda I) = 0$$

Resolvendo a equação $(A - \lambda I)v = 0$ para o vetor v com diferentes valores de λ:

$$\begin{pmatrix} 0.80000 - \lambda & -0.252982 & 0.038490 & -0.144791 \\ -0.252982 & 0.80000 - \lambda & 0.511208 & 0.494498 \\ 0.038490 & 0.511208 & 0.80000 - \lambda & 0.752355 \\ -0.144791 & 0.494498 & 0.752355 & 0.80000 - \lambda \end{pmatrix} x \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix} = 0$$

Para λ = 2,51579324, resolvendo a equação acima usando a regra de Cramer, os valores para o vetor v são:

v1 = 0,16195986, v2 = -0,52404813, v3 = -0,58589647 e v4 = -0,59654663

Passo 4: Classifique os autovalores e seus autovetores correspondentes

Utilizando o python como nossa ferramenta de aprendizado e desenvolvimento, temos os seguinte resultado dos autovetores:

```
Os autovetores são:
[[ 0.16195986 -0.91705888 -0.30707099  0.19616173]
 [-0.52404813  0.20692161 -0.81731886  0.12061043]
 [-0.58589647 -0.3205394   0.1882497  -0.72009851]
 [-0.59654663 -0.11593512  0.44973251  0.65454704]]
```

Como os autovalores já estão classificados neste caso, não há necessidade de classificá-los novamente.

Passo 5: Escolha k autovalores e forme uma matriz de autovetores

Se escolhermos os 2 autovetores superiores, a matriz ficará assim:

```
Os autovetores são:
[[ 0.16195986 -0.91705888 -0.30707099  0.19616173]
 [-0.52404813  0.20692161 -0.81731886  0.12061043]
 [-0.58589647 -0.3205394   0.1882497  -0.72009851]
 [-0.59654663 -0.11593512  0.44973251  0.65454704]]
```

```
As duas colunas selecionadas:
 [[ 0.16195986 -0.91705888]
 [-0.52404813  0.20692161]
 [-0.58589647 -0.3205394 ]
 [-0.59654663 -0.11593512]]
```

Passo 6: Transforme a matriz original

Matriz de características * principais k autovetores = Dados transformados

Matriz Padronizado

F1	F2	F3	F4
-1.000000	-0.632456	0.000000	0.260623
0.333333	1.264911	1.732051	1.563740
-1.000000	0.632456	-0.577350	-0.173749
0.333333	0.000000	-0.577350	-1.042493
1.333333	-1.264911	-0.577350	-0.608121

×

Autovetores Selecionados

```
[[ 0.16195986 -0.91705888]
 [-0.52404813  0.20692161]
 [-0.58589647 -0.3205394 ]
 [-0.59654663 -0.11593512]]
```

=

PC1	PC2
0.014003	0.755975
-2.556534	-0.780432
-0.051480	1.253135
1.014150	0.000239
1.579861	-1.228917

Descanso...

Para o Professor =)

Exercícios

1 - Considere o conjunto de dados: [4, 8, 6, 5, 3]. Calcule a variância amostral desses dados. (R: 3,7)

2 - Considere os seguintes conjuntos de dados para as variáveis X e Y:

→X: [2, 4, 6, 8];

→Y: [1, 3, 2, 5].

Calcule a covariância amostral entre X e Y. (R: 3,67)

3 - Utilize os conjuntos de dados das variáveis X e Y da Atividade 2 para construir a matriz de covariância. (R: $C = \begin{pmatrix} 6{,}67 & 3{,}67 \\ 3{,}67 & 2{,}92 \end{pmatrix}$)

Exercícios

4 - Dada a matriz de covariância obtida na Atividade 3. Calcule os autovalores e autovetores dessa matriz. (R: $\lambda = \begin{bmatrix} 2 & 0 \end{bmatrix}$ e $v = \begin{bmatrix} 0.7071 & -0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$)

5 - Considere o seguinte conjunto de dados bidimensionais:

X	Y
2	3
3	3
4	5
5	8
6	8

Aplique a Análise de Componentes Principais (PCA) para transformar esses dados em um novo sistema de coordenadas.