



UNIVERSIDADE
FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO
DE COMPUTAÇÃO

Aprendizagem de Máquina Probabilística

César Lincoln Cavalcante Mattos

2024

Agenda

① Algoritmo PCA probabilístico

Solução analítica

Solução via algoritmo EM

② Análise fatorial

③ Tópicos adicionais

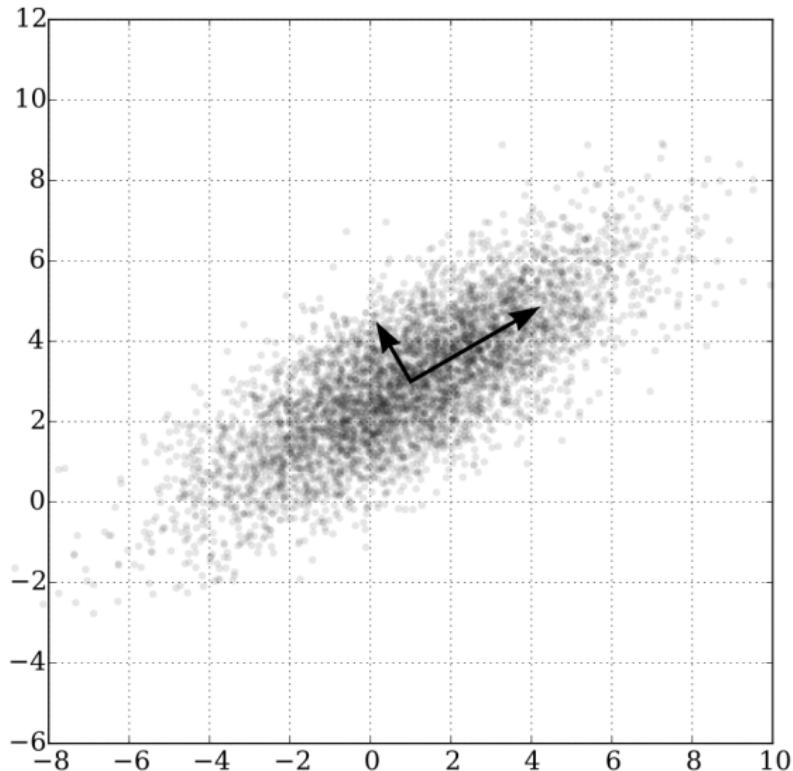
④ Referências

Análise de Componentes Principais

Principal Component Analysis (PCA)

- Método **não-supervisionado** de **projeção linear** de dados.
- Também chamado de **Transformada de Karhunen-Loève**.
- Pode ser usado para redução de dimensionalidade escolhendo-se um subconjunto dos atributos gerados.
- **Considerações:**
 - Os dados são contínuos;
 - A informação está na maneira como os atributos variam.

Ilustração do conceito de componentes principais



Análise de Componentes Principais

- Sejam N padrões D -dimensionais $\mathbf{x}_i|_{i=1}^N$.
- Queremos obter uma projeção $\mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^M$, $M \leq D$, tal que:

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{P}\mathbf{x}_i,$$

em que $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{M \times D}$ é a **matriz de projeção**.

- **Objetivo:** Maximizar a variância dos dados projetados.

Análise de Componentes Principais

- Seja $\mathbf{p}_m \in \mathbb{R}^D$ a m -ésima linha da matriz de projeção \mathbf{P} .
- A variância dos dados projetos na componente \mathbf{p}_1 , i.e., $z_{i1} = \mathbf{p}_1^\top \mathbf{x}_i$, é dada por:

$$\sigma_1^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{p}_1^\top \mathbf{x}_i - \mathbf{p}_1^\top \boldsymbol{\mu})^2, \quad \text{em que } \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i.$$

- Trabalhando a expressão anterior, temos:

$$\sigma_1^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_1^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \mathbf{p}_1$$

$$\sigma_1^2 = \mathbf{p}_1^\top \Sigma \mathbf{p}_1, \quad \text{em que } \Sigma = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top.$$

- Note que $\Sigma \in \mathbb{R}^{D \times D}$ é a matriz de covariância dos dados originais $\mathbf{x}_i |_{i=1}^N$.

Análise de Componentes Principais

- Desejamos maximizar a variância projetada $\sigma_1^2 = \mathbf{p}_1^\top \Sigma \mathbf{p}_1$.
- Para isso, limitamos a norma do vetor de projeção: $\mathbf{p}_1^\top \mathbf{p}_1 = 1$.
- Temos o seguinte problema de otimização com restrições:

$$\underset{\mathbf{p}_1}{\text{Maximize}} \quad \mathbf{p}_1^\top \Sigma \mathbf{p}_1,$$

$$\text{s.a.} \quad \mathbf{p}_1^\top \mathbf{p}_1 = 1.$$

- Incluímos o multiplicador de Lagrange $\lambda_1 \geq 0$ para obter um problema sem restrições:

$$\mathcal{L} = \mathbf{p}_1^\top \Sigma \mathbf{p}_1 + \lambda_1(1 - \mathbf{p}_1^\top \mathbf{p}_1).$$

- Sabendo que: $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}_1} = 0$, temos:

$$2\Sigma \mathbf{p}_1 - 2\lambda_1 \mathbf{p}_1 = 0$$

$$\Sigma \mathbf{p}_1 = \lambda_1 \mathbf{p}_1.$$

Análise de Componentes Principais

- A condição $\Sigma p_1 = \lambda_1 p_1$ garante que p_1 é **autovetor** da matriz de covariância Σ dos dados, com **autovalor** correspondente λ_1 .
- A variância projetada σ_1^2 será agora dada por:

$$\sigma_1^2 = p_1^\top \Sigma p_1 = \lambda_1 p_1^\top p_1 = \lambda_1.$$

- Logo, σ_1^2 será maximizada escolhendo-se p_1 igual ao **autovetor correspondente ao maior autovalor**.
- Os demais vetores de projeção correspondem aos demais autovetores da matriz Σ .

Análise de Componentes Principais

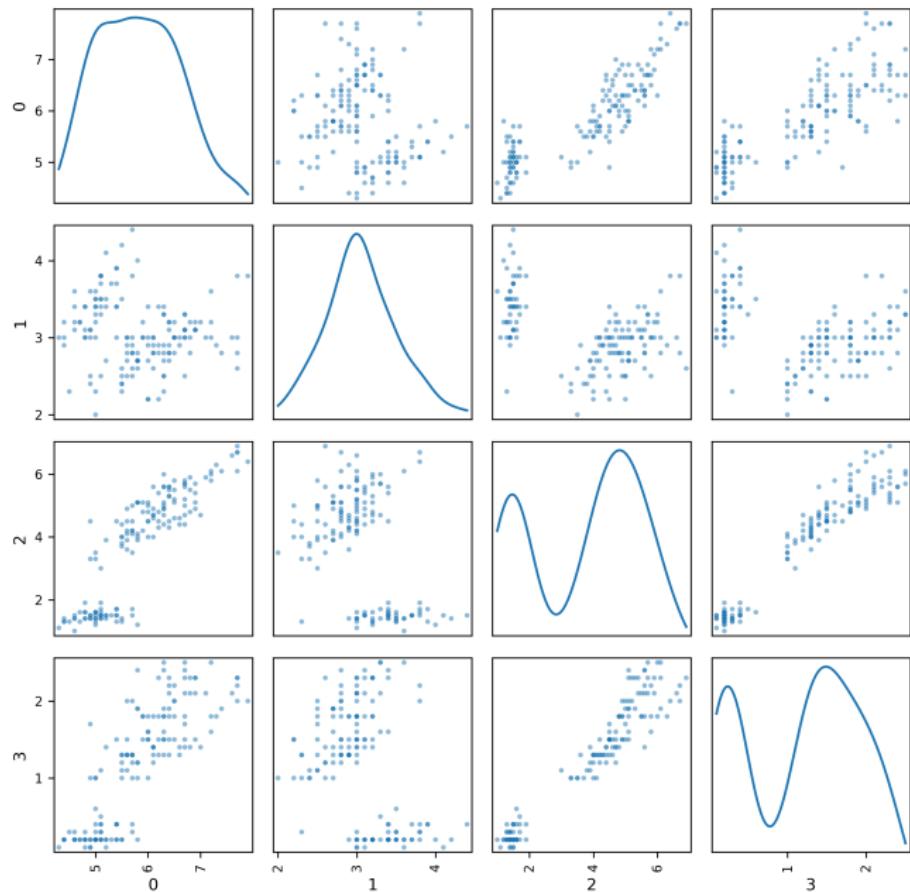
Algoritmo PCA

- ① Calcule a matriz de covariância dos dados $\mathbf{x}_i|_{i=1}^N$:

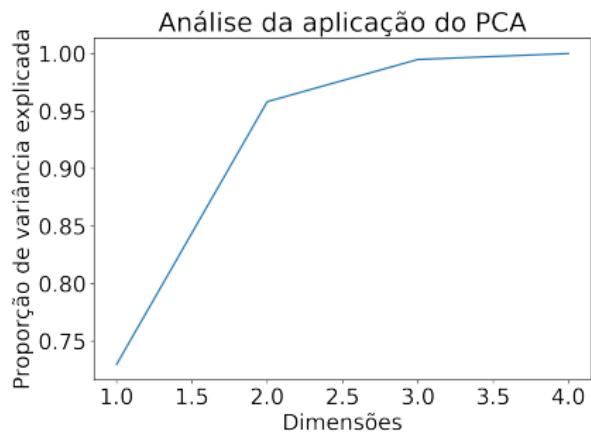
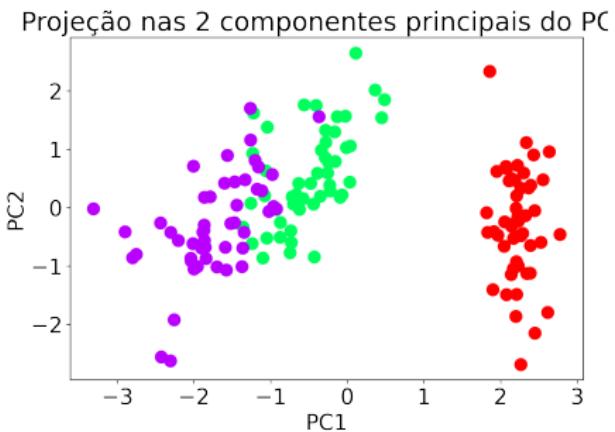
$$\Sigma = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top, \quad \text{em que } \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i.$$

- ② Encontre os M autovetores $\mathbf{p}_m|_{m=1}^M$ da matriz de covariância Σ correspondentes aos M maiores autovalores $\lambda_m|_{m=1}^M$.
 - ③ Os M autovetores selecionados formarão as linhas da matriz de projeção $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{M \times D}$.
 - ④ **Variância explicada:** $\sum_{m=1}^M \lambda_m$.
 - ⑤ **Projeção linear dos dados:** $\mathbf{z}_i = \mathbf{P}\mathbf{x}_i, \quad i \in \{1, \dots, N\}$.
-
- **Nota:** Recomenda-se normalizar os dados antes da estimação.

Exemplo de aplicação do PCA - Íris



Exemplo de aplicação do PCA - Íris



Análise de Componentes Principais

SVD - Singular Value Decomposition

- Método de fatoração de matrizes que generaliza a decomposição de autovetores/autovalores.
- Uma matriz $M \in \mathbb{R}^{A \times B}$ pode ser decomposta como

$$M = USV^\top.$$

- $S \in \mathbb{R}^{A \times B}$ reúne em sua “diagonal” os valores singulares de M .
- $U \in \mathbb{R}^{A \times A}$ e $V^\top \in \mathbb{R}^{B \times B}$ são ortogonais.
- Para uma matriz M quadrada:
 - S é diagonal com elementos iguais aos autovalores de M .
 - $U = V$ possui os autovetores de M nas colunas.

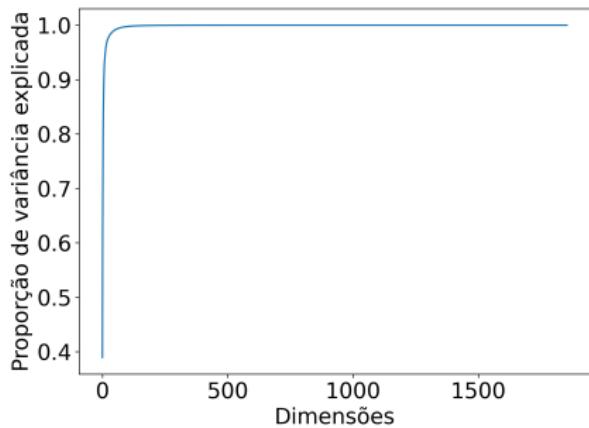
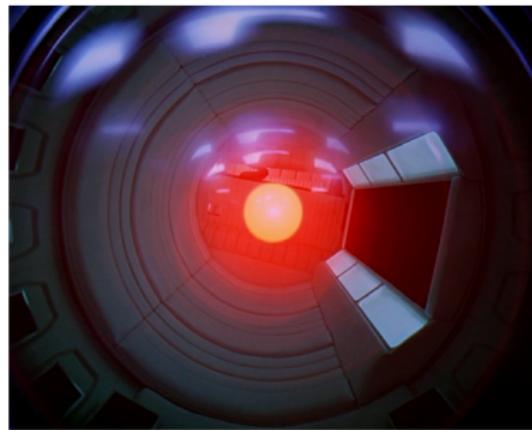
PCA via SVD

- Seja $\bar{X} = X - \mu$ e $\bar{X} = USV^\top$:
 $\Sigma \propto \bar{X}^\top \bar{X} = VS^\top U^\top USV^\top = V \tilde{S} V^\top$, em que $\tilde{S} = S^\top S$.
- Por ser uma decomposição espectral, temos $P = V^\top$.

Análise de Componentes Principais

- **Matriz de projeção:** $P \in \mathbb{R}^{M \times D}$.
- **Projeção linear dos dados:** $z_i = P(x_i - \mu)$.
- **Reconstrução das projeções:** $\hat{x}_i = \mu + P^\top z_i$.
- Para $M < D$, há a compressão dos dados originais.

Exemplo de compactação de imagem com PCA



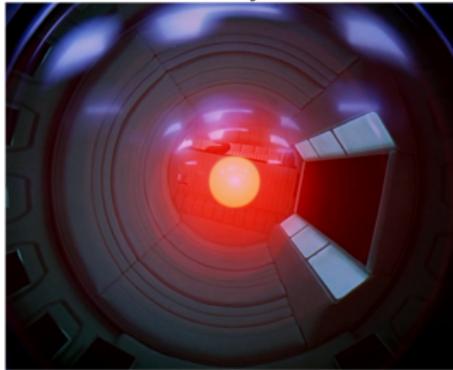
Número de linhas: 500

Número de colunas: 618

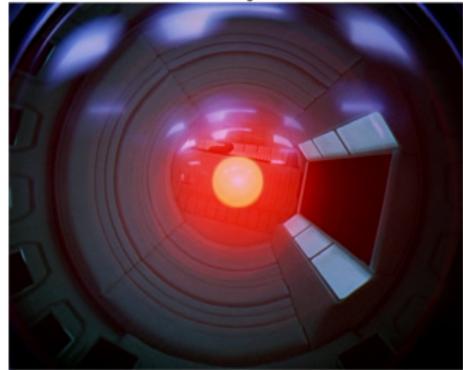
Número de canais: 3

Exemplo de compactação de imagem com PCA

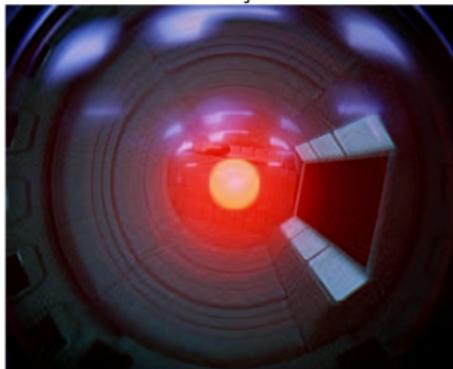
500 componentes principais
Erro de reconstrução = 8.40e-22



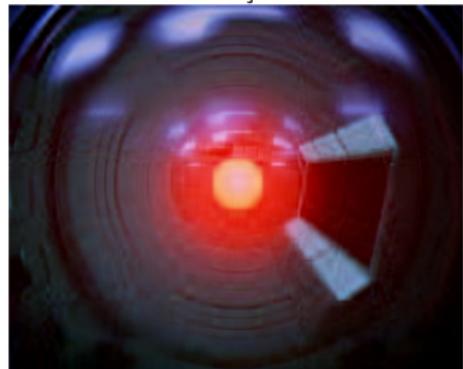
100 componentes principais
Erro de reconstrução = 5.69e+01



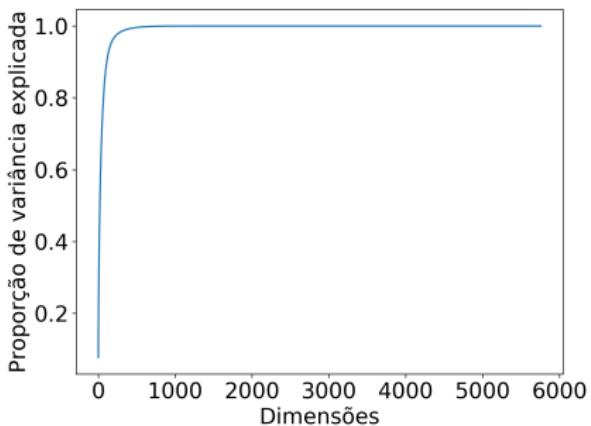
50 componentes principais
Erro de reconstrução = 2.14e+02



25 componentes principais
Erro de reconstrução = 5.38e+02



Exemplo de compactação de imagem com PCA



Número de linhas: 1176

Número de colunas: 1920

Número de canais: 3

Exemplo de compactação de imagem com PCA

500 componentes principais
Erro de reconstrução = $1.09e+03$



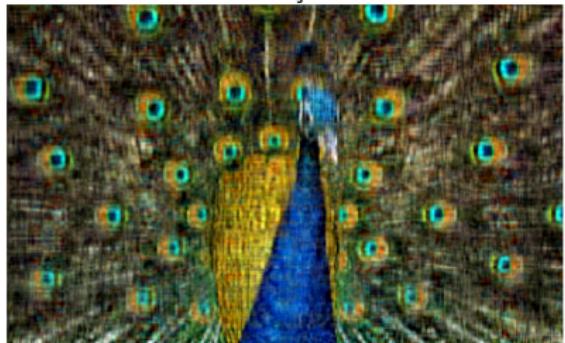
100 componentes principais
Erro de reconstrução = $3.15e+04$



50 componentes principais
Erro de reconstrução = $7.42e+04$

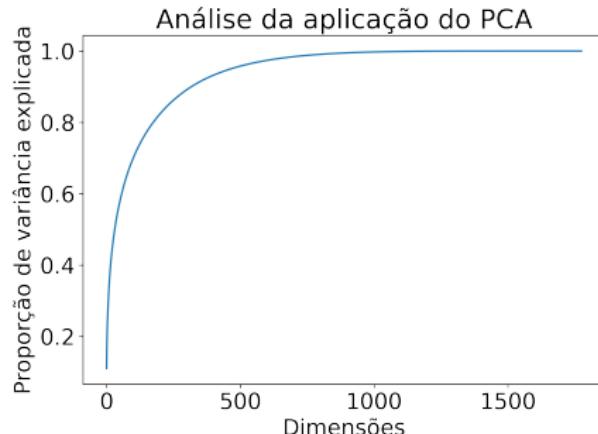


25 componentes principais
Erro de reconstrução = $1.22e+05$

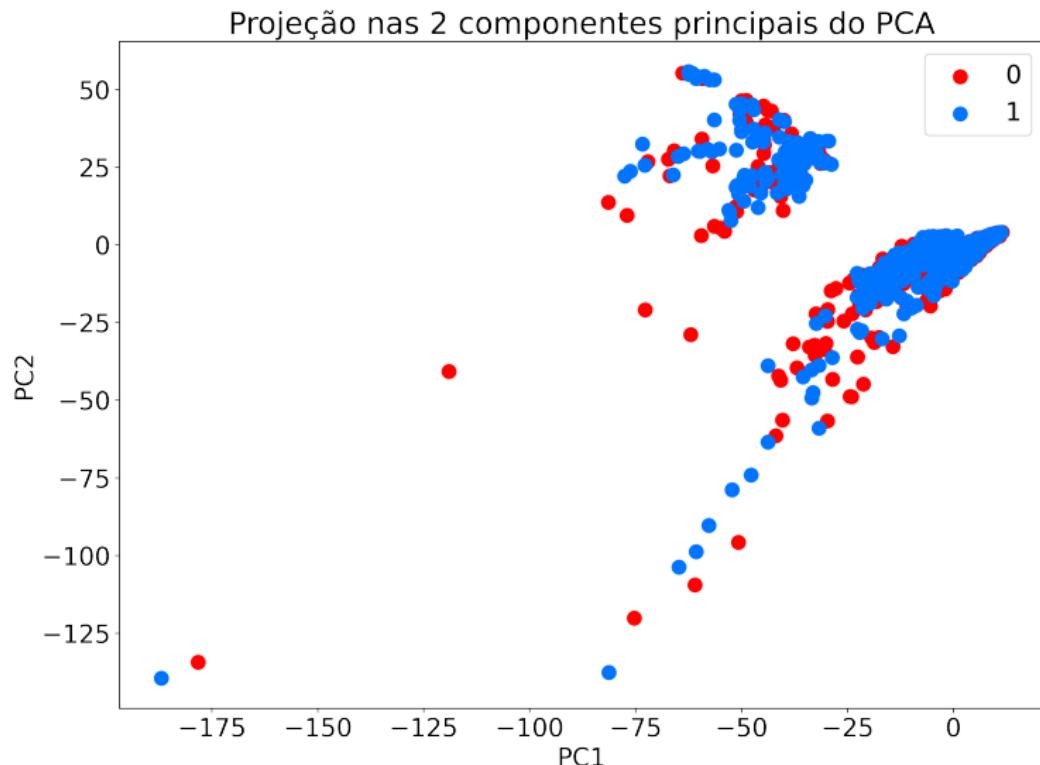


Exemplo de pré-processamento com PCA

- **Dados:** Bioresponse - 3751 padrões, 2 classes, 30% para teste.
- **Modelo:** MLP ($N_H = 64$, tanh).
 - Atributos: 1776 - Erro no treinamento: 0%; Erro no teste: 24.02%
 - Atributos (projeção via PCA, 0.95 de variância explicada): 466
 - Erro no treinamento: 0.11%; Erro no teste: 23.75%
 - Atributos (projeção via PCA, 0.9 de variância explicada): 318
 - Erro no treinamento: 0.61%; Erro no teste: 22.95%
 - Atributos (projeção via PCA, 0.8 de variância explicada): 176
 - Erro no treinamento: 2.85%; Erro no teste: 22.95%



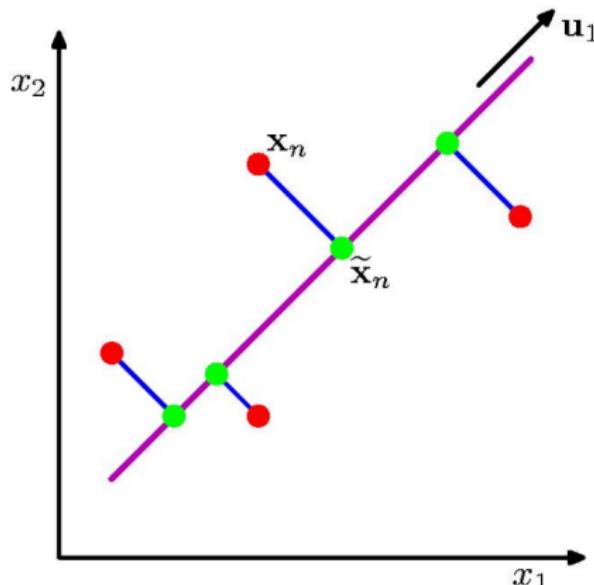
Visualização de dados multidimensionais



Biorespose - 1776 dimensões projetadas em 2.

Análise de Componentes Principais

- Duas abordagens para derivar o algoritmo PCA:
 - **Maximização da variância projetada:** espalhamento dos pontos projetados (verdes).
 - **Minimização do erro de reconstrução:** distância entre pontos originais (vermelhos) e a reconstrução.



Análise de Componentes Principais

Algoritmo PCA (visão alternativa)

- ① Encontrar os M vetores que compõem a matriz $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{M \times D}$ e que solucionem o problema abaixo:

$$\underset{\mathbf{P}}{\text{Minimize}} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{x}_i - \hat{\mathbf{x}}_i\|^2, \quad \text{em que } \hat{\mathbf{x}}_i = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{P}^\top \mathbf{P}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}).$$

- ② **Solução:** M autovetores $\mathbf{p}_m|_{m=1}^M$ da matriz de covariância Σ correspondentes aos M maiores autovalores $\lambda_m|_{m=1}^M$.

- A demonstração está em Barber (2012), pg. 324, em “Deriving the optimal linear reconstruction”.

PCA para dados de alta dimensão

- Para cenários em que $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times D}$, $D \gg N, D \gg 1$, a matriz de covariância Σ pode ser grande demais:

$$\Sigma = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top = \frac{1}{N-1} \bar{\mathbf{X}}^\top \bar{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{D \times D}.$$

- No entanto, o número de autovalores não-nulos é limitado pelo menor valor entre N e D .
- Assim, a decomposição espectral $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{D \times N}$, $\Lambda \in \mathbb{R}^{N \times N}$ será:

$$\frac{1}{N-1} \bar{\mathbf{X}}^\top \bar{\mathbf{X}} \mathbf{U} = \mathbf{U} \Lambda,$$

$$\frac{1}{N-1} \bar{\mathbf{X}} \bar{\mathbf{X}}^\top \bar{\mathbf{X}} \mathbf{U} = \bar{\mathbf{X}} \mathbf{U} \Lambda,$$

$$\frac{1}{N-1} \bar{\mathbf{X}} \bar{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{U}} = \tilde{\mathbf{U}} \Lambda.$$

- Sendo $\tilde{\mathbf{U}} = \bar{\mathbf{X}} \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ os autovetores de $\bar{\mathbf{X}} \bar{\mathbf{X}}^\top \in \mathbb{R}^{N \times N}$:

$$\mathbf{U} = (N-1)^{-1/2} \mathbf{X}^\top \tilde{\mathbf{U}} \Lambda^{-1/2}, \quad (\text{Bishop, pg. 570}).$$

Agenda

① Algoritmo PCA probabilístico

Solução analítica

Solução via algoritmo EM

② Análise fatorial

③ Tópicos adicionais

④ Referências

Modelos de variáveis latentes contínuas

- Modelos de misturas possuem variáveis latentes (não observadas) discretas.
- Algumas situações exigem modelar variáveis latentes por distribuições contínuas.
- **Motivação:** Observações multidimensionais semelhantes podem estar próximas em um espaço projetado (um *manifold*) de dimensão (muito) inferior.

Modelos de variáveis latentes contínuas

- Definimos uma **priori** $p(z)$ para a variável latente contínua.
- Definimos uma **verossimilhança** $p(x|z)$ relacionando a variável latente e a observação.
- Expressões de interesse:
 - **Verossimilhança marginal:**

$$p(x) = \int p(x|z)p(z)dz.$$

→ **Posteriori:**

$$p(z|x) = \frac{p(x|z)p(z)}{p(x)}.$$

- **Visão gerativa:** Variáveis latentes são amostradas a partir de uma priori, que por sua vez geram “observações” via uma verossimilhança.
- **Análise de Componentes Principais (PCA):** Modelo **linear** em que a priori e a verossimilhança são **Gaussianas**.

PCA probabilístico

- Seja a observação $x \in \mathbb{R}^D$ associada à variável latente $z \in \mathbb{R}^L$.
- Definimos uma **priori Gaussiana** para o espaço latente:

$$p(z) = \mathcal{N}(z | \mathbf{0}, \mathbf{I}).$$

- Para a observação, escolhemos uma **verossimilhança Gaussiana** e uma relação **linear** com z :

$$p(x|z) = \mathcal{N}(x | \mathbf{W}z + \boldsymbol{\mu}, \sigma^2 \mathbf{I}), \quad \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{(D \times L)}, \quad \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^D, \quad \sigma^2 > 0.$$

→ Os parâmetros fixos de $p(z)$ são suficientemente gerais, pois podemos modificar os parâmetros de $p(x|z)$ livremente.

- Note que podemos **fatorar** $p(x|z)$ pelas dimensões de x :

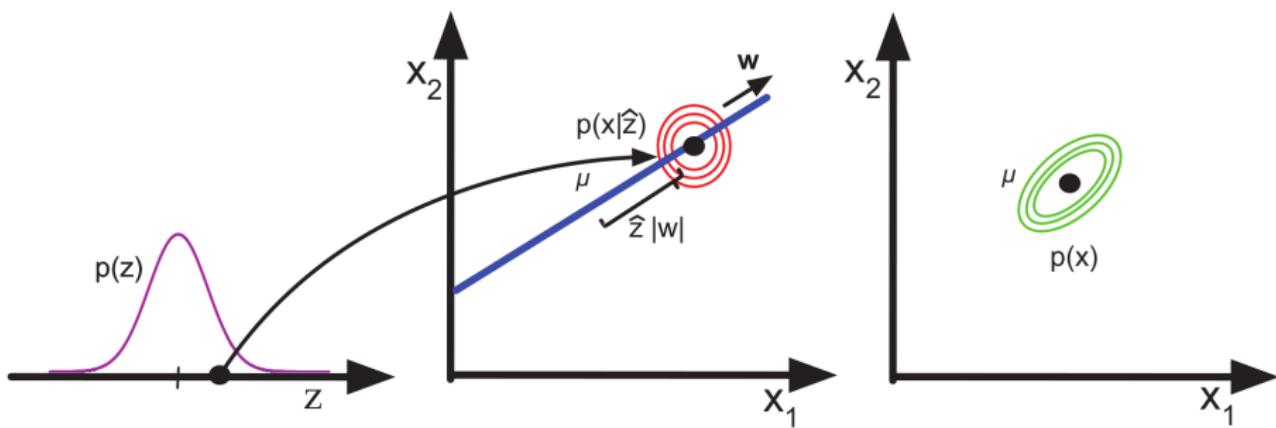
$$p(x|z) = \prod_{d=1}^D \mathcal{N}(x_d | \mathbf{w}_d^\top z + \mu_d, \sigma^2),$$

em que \mathbf{w}_d é a d -ésima linha de \mathbf{W} .

PCA probabilístico

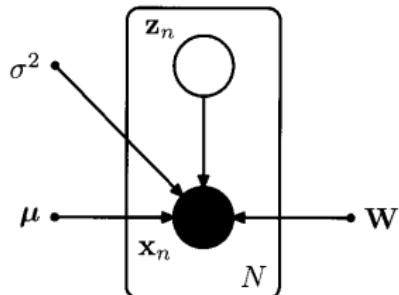
- Alternativamente, podemos imaginar uma amostra $\hat{z} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ usada para obter x a partir de uma transformação linear e um **ruído de observação** ϵ :

$$x = W\hat{z} + \mu + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}).$$



- Note que $p(x|z)$ é uma Gaussiana esférica, enquanto a marginal $p(x)$ pode ser uma Gaussiana não-esférica.

PCA probabilístico - Modelo gráfico probabilístico



$$\begin{aligned} p(x, z | \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma^2) &= p(x|z, \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma^2)p(z) \\ &= \mathcal{N}(x | \mathbf{W}z + \boldsymbol{\mu}, \sigma^2 \mathbf{I})\mathcal{N}(z | \mathbf{0}, \mathbf{I}). \end{aligned}$$

- Círculos indicam **variáveis aleatórias**.
 - Nós preenchidos são **observados**.
 - Nós em branco não são observados (são **latentes**).
- Variáveis **determinísticas** são representados por pontos.
- Setas direcionadas indicam **dependência**.
- A moldura (*plate*) indica a **repetição** dos nós que cerca.

PCA probabilístico

- A **verossimilhança marginal** da observação é dada por:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}) &= \int p(\mathbf{x}|\mathbf{z})p(\mathbf{z})d\mathbf{z} \\ &= \int \mathcal{N}(\mathbf{x}|\mathbf{W}\mathbf{z} + \boldsymbol{\mu}, \sigma^2 \mathbf{I}) \mathcal{N}(\mathbf{z}|\mathbf{0}, \mathbf{I}) d\mathbf{z} \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}\mathbf{W}^\top + \sigma^2 \mathbf{I}). \end{aligned}$$

- No entanto, a escolha dos parâmetros do modelo **não é única**.
- Suponha que façamos $\tilde{\mathbf{W}} = \mathbf{W}\mathbf{R}$ em que $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{(L \times L)}$ é uma matriz **ortogonal** (ou seja, $\mathbf{R}\mathbf{R}^\top = \mathbf{I}$):

$$\tilde{\mathbf{W}} \tilde{\mathbf{W}}^\top = \mathbf{W}\mathbf{R}(\mathbf{W}\mathbf{R})^\top = \mathbf{W}\mathbf{R}\mathbf{R}^\top \mathbf{W}^\top = \mathbf{W}\mathbf{W}^\top.$$

- Qualquer matriz de rotação ortogonal \mathbf{R} não altera o modelo.

PCA probabilístico

- Buscamos estimações de **máxima verossimilhança** para os parâmetros $\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma^2$.
- Considerando N observações organizadas na matriz $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{(N \times D)}$:

$$\begin{aligned}\log p(\mathbf{X} | \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma^2) &= \log \prod_{i=1}^N p(\mathbf{x}_i | \mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma^2) \\ &= \sum_{i=1}^N \log \mathcal{N}(\mathbf{x}_i | \boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}\mathbf{W}^\top + \sigma^2 \mathbf{I}) \\ &= -\frac{ND}{2} \log(2\pi) - \frac{N}{2} \log |\Sigma| - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top \Sigma^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}),\end{aligned}$$

em que $\Sigma = \mathbf{W}\mathbf{W}^\top + \sigma^2 \mathbf{I}$.

PCA probabilístico

- Precisamos computar a inversa $\Sigma^{-1} = (\mathbf{W}\mathbf{W}^\top + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1}$ D -dimensional, mas podemos usar a **identidade de Woodbury**:

$$(\mathbf{A} + \mathbf{U}\mathbf{C}\mathbf{V})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{U} (\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{V}\mathbf{A}^{-1} \mathbf{U})^{-1} \mathbf{V}\mathbf{A}^{-1}.$$

- Assim:

$$\Sigma^{-1} = (\mathbf{W}\mathbf{W}^\top + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1} = \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{I} - \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{W} (\mathbf{W}^\top \mathbf{W} + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{W}^\top,$$

em que precisamos inverter a matriz $\mathbf{M} = \mathbf{W}^\top \mathbf{W} + \sigma^2 \mathbf{I}$, que é L -dimensional.

- Como usualmente temos $L < D$, damos preferência à última expressão.

PCA probabilístico

- As estimativas de máxima verossimilhança serão dadas por:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i, \quad \hat{\mathbf{W}} = \mathbf{V} (\Lambda - \hat{\sigma}^2 \mathbf{I})^{\frac{1}{2}} \mathbf{R}, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{D-L} \sum_{j=L+1}^D \lambda_j,$$

- $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{(D \times L)}$ é formada pelos L autovetores da matriz $\mathbf{S} = \frac{1}{N-1} \sum_i (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})$ correspondentes aos L maiores autovalores;
- Λ é a matriz diagonal formada pelos L maiores autovalores da matriz \mathbf{S} ;
- A estimativa da variância $\hat{\sigma}^2$ é dada pela média dos autovalores da matriz \mathbf{S} não presentes na diagonal de Λ ;
- $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{(L \times L)}$ é uma matriz ortogonal qualquer (podemos escolher $\mathbf{R} = \mathbf{I}$).
- Para $\sigma^2 \rightarrow 0$ temos $\hat{\mathbf{W}} \rightarrow \mathbf{V} \Lambda^{\frac{1}{2}}$, proporcional ao PCA tradicional.

PCA probabilístico

- A **posteriori** de z_i também é **analítica**:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}_i | \mathbf{x}_i) &= \frac{p(\mathbf{x}_i | \mathbf{z}_i)p(\mathbf{z}_i)}{p(\mathbf{x}_i)} \\ &\propto \mathcal{N}(\mathbf{x}_i | \hat{\mathbf{W}}\mathbf{z}_i + \hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\sigma}^2 \mathbf{I}) \mathcal{N}(\mathbf{z}_i | \mathbf{0}, \mathbf{I}) \\ &= \mathcal{N}(\mathbf{z}_i | \hat{\mathbf{M}}^{-1} \hat{\mathbf{W}}^\top (\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}), \hat{\sigma}^2 \hat{\mathbf{M}}^{-1}). \end{aligned}$$

em que usamos a propriedade de condicionamento da Gaussiana e fizemos $\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{W}}^\top \hat{\mathbf{W}} + \hat{\sigma}^2 \mathbf{I}$.

- Para $\sigma^2 \rightarrow 0$ temos $\hat{\mathbf{W}} \rightarrow \mathbf{V}$, $\hat{\mathbf{M}} \rightarrow \mathbf{I}$, $\hat{\mathbf{z}}_i \rightarrow \mathbf{V}^\top (\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}})$ e $\hat{\mathbf{x}}_i \rightarrow \mathbf{V}\hat{\mathbf{z}}_i + \hat{\boldsymbol{\mu}}$, como no PCA tradicional.

PCA probabilístico

Algoritmo PCA probabilístico

- ① Calcule a matriz de covariância S a partir dos dados $\mathbf{x}_i|_{i=1}^N$:

$$\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i, \quad S = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \hat{\mu})(\mathbf{x}_i - \hat{\mu})^\top.$$

- ② Construa $V \in \mathbb{R}^{D \times L}$ com os L autovetores de S correspondentes aos maiores autovalores $\lambda_j|_{j=1}^L$ e $\Lambda = \text{diag}(\lambda_j|_{j=1}^L)$.

- ③ Calcule os demais parâmetros do modelo:

$$\hat{W} = V(\Lambda - \hat{\sigma}^2 I)^{\frac{1}{2}}, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{D-L} \sum_{j=L+1}^D \lambda_j, \quad \hat{M} = \hat{W}^\top \hat{W} + \hat{\sigma}^2 I,$$

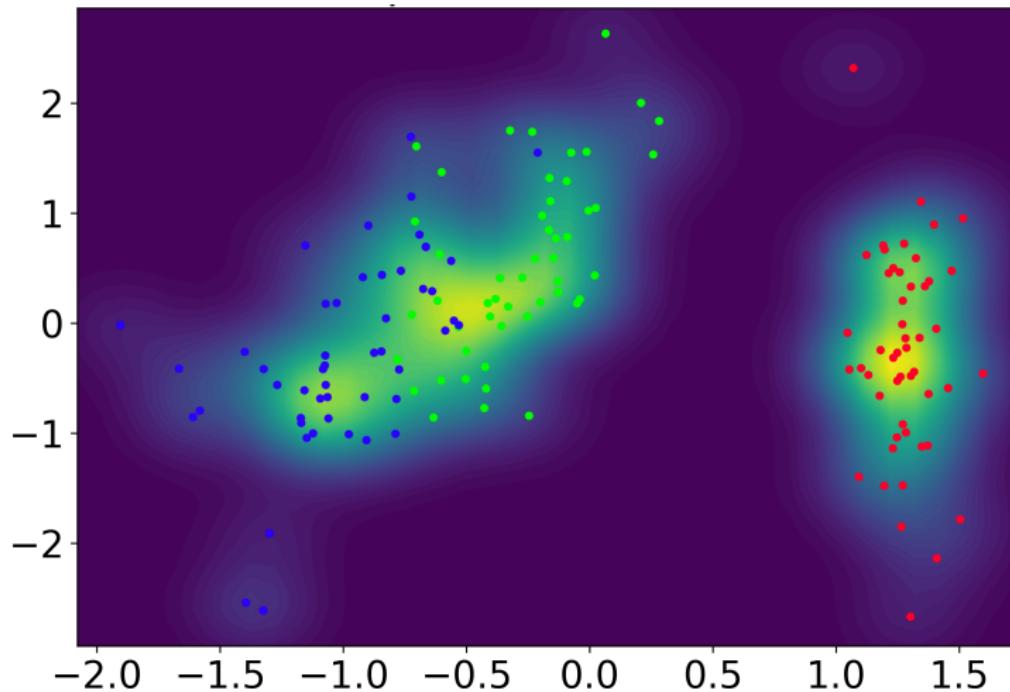
- **Projeção linear probabilística dos dados:**

$$p(z_i|\mathbf{x}_i) = \mathcal{N}(z_i|\hat{M}^{-1} \hat{W}^\top (\mathbf{x}_i - \hat{\mu}), \hat{\sigma}^2 \hat{M}^{-1}).$$

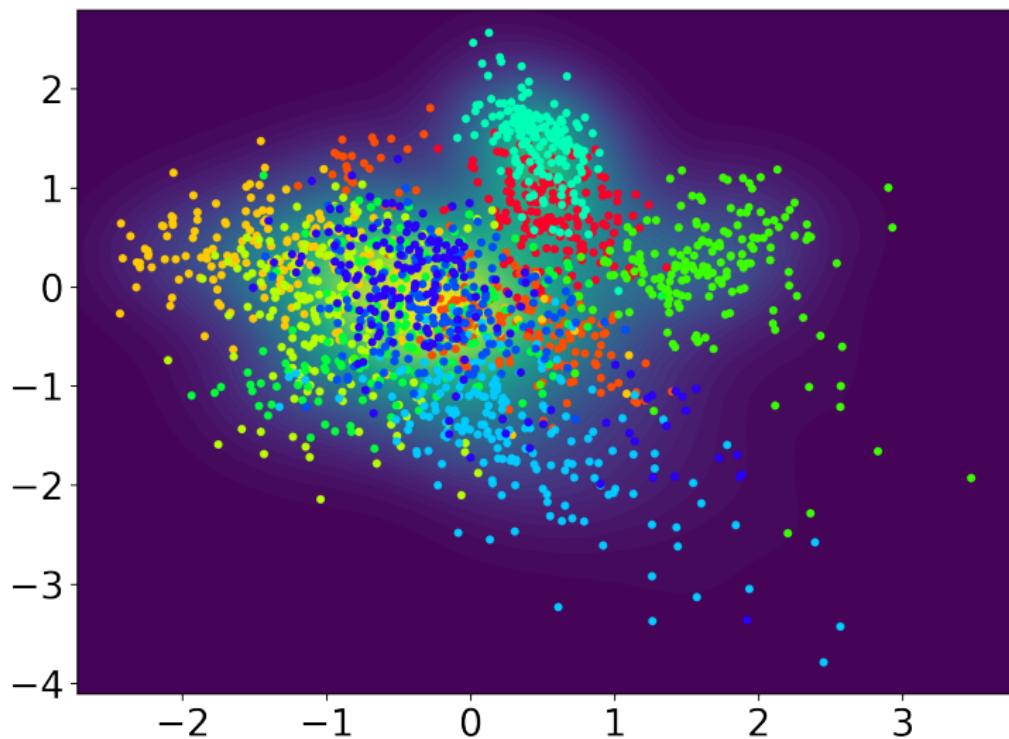
- **Reconstrução probabilística das projeções:**

$$p(\mathbf{x}_i|z_i) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_i|\hat{W} z_i + \hat{\mu}, \hat{\sigma}^2 I).$$

PCA probabilístico - Projeção 2D - Íris

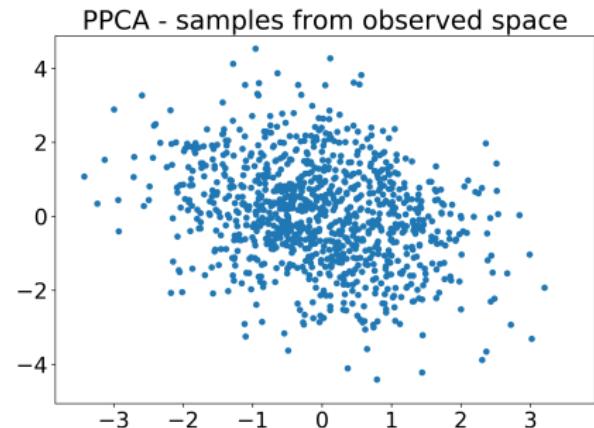
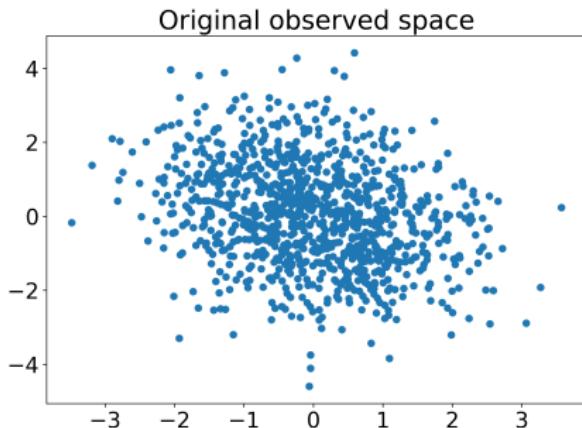


PCA probabilístico - Projeção 2D - Digits



PCA probabilístico - gerando amostras

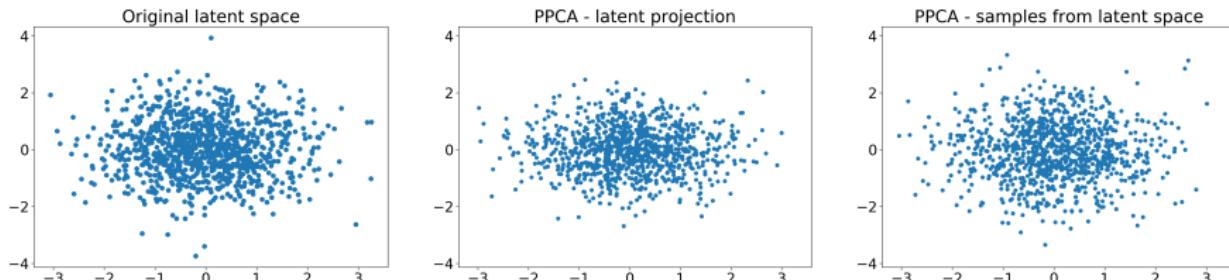
$D = 2, L = 1$



$$W = \begin{bmatrix} -0.40941532 \\ 0.95788668 \end{bmatrix}, \quad \hat{W} = \begin{bmatrix} -0.42237625 \\ 0.95572549 \end{bmatrix}$$

PCA probabilístico - espaço latente

$D = 5, L = 2$



$$W = \begin{bmatrix} -0.40941532 & 0.95788668 \\ -1.03887743 & -1.11146061 \\ 3.93156115 & 2.78681167 \\ 0.18581575 & 0.56349231 \\ 1.53804514 & 2.49286947 \end{bmatrix}, \quad \hat{W} = \begin{bmatrix} -0.3359679 & -0.97197374 \\ 1.5385019 & 0.09994756 \\ -4.85505746 & 0.58785244 \\ -0.5047775 & -0.30446013 \\ -2.78102841 & -0.79828427 \end{bmatrix}$$

Problema de identificabilidade por causa de simetrias nos dados!

A estimativa pode ser rotacionada em um ângulo θ pela matriz R :

$$R = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

PCA probabilístico - espaço latente

$$D = 5, L = 2$$

- Se tivermos \mathbf{W} , podemos aproximar a matriz de rotação \mathbf{R} :

$$\mathbf{W} = \hat{\mathbf{W}} \mathbf{R},$$

$$\hat{\mathbf{R}} = (\hat{\mathbf{W}}^\top \hat{\mathbf{W}})^{-1} \hat{\mathbf{W}}^\top \mathbf{W},$$

$$\hat{\mathbf{W}}_{\text{rotated}} = \hat{\mathbf{W}} \hat{\mathbf{R}}.$$

- Para o exemplo anterior:

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} -0.40941532 & 0.95788668 \\ -1.03887743 & -1.11146061 \\ 3.93156115 & 2.78681167 \\ 0.18581575 & 0.56349231 \\ 1.53804514 & 2.49286947 \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{W}} = \begin{bmatrix} -0.3359679 & -0.97197374 \\ 1.5385019 & 0.09994756 \\ -4.85505746 & 0.58785244 \\ -0.5047775 & -0.30446013 \\ -2.78102841 & -0.79828427 \end{bmatrix}$$

$$\hat{\mathbf{R}} = \begin{bmatrix} -0.73206802 & -0.66917947 \\ 0.65061785 & -0.77107569 \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{W}}_{\text{rotated}} = \begin{bmatrix} -0.3864321 & 0.97428815 \\ -1.06126038 & -1.10660102 \\ 3.93669961 & 2.79562605 \\ 0.17144427 & 0.57254854 \\ 1.51652397 & 2.47654471 \end{bmatrix}$$

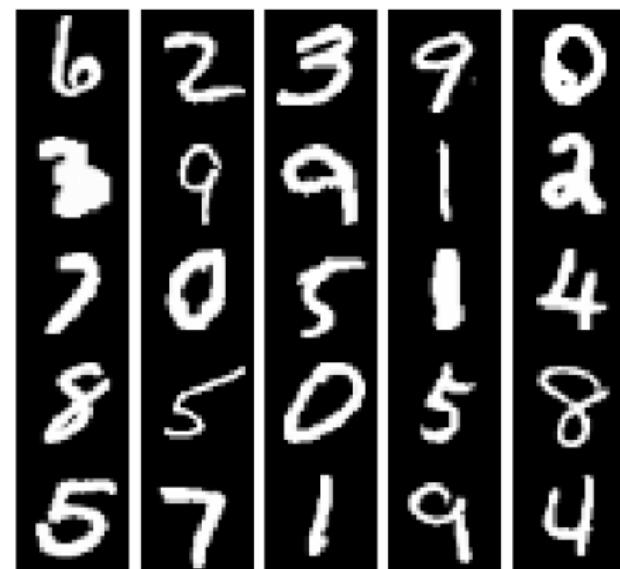
Somente útil para confirmar que estimamos os eixos adequadamente.

PCA probabilístico - MNIST ($D = 784$)

Original samples from class 9



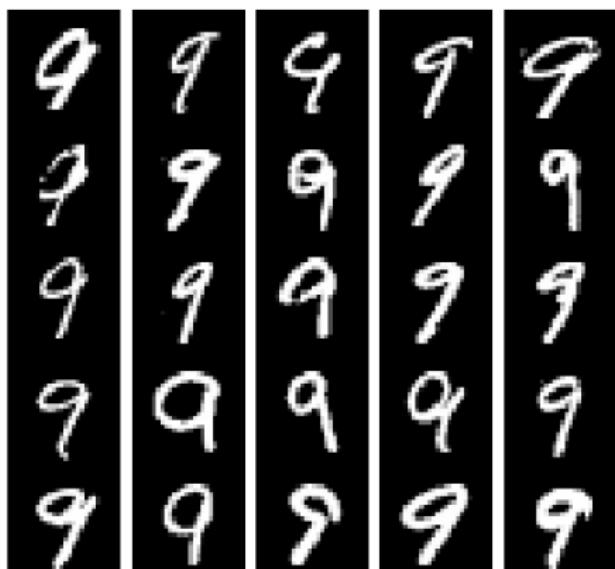
Original samples from all classes



- **Reconstrução:** Obter um modelo generativo capaz de codificar e decodificar padrões.
- **Geração:** Obter um modelo generativo e amostrar de um espaço latente para gerar novas “observações” (sem adição de ruído).

PPCA - Reconstrução MNIST9 ($D = 784, L = 2$)

Original samples from class 9

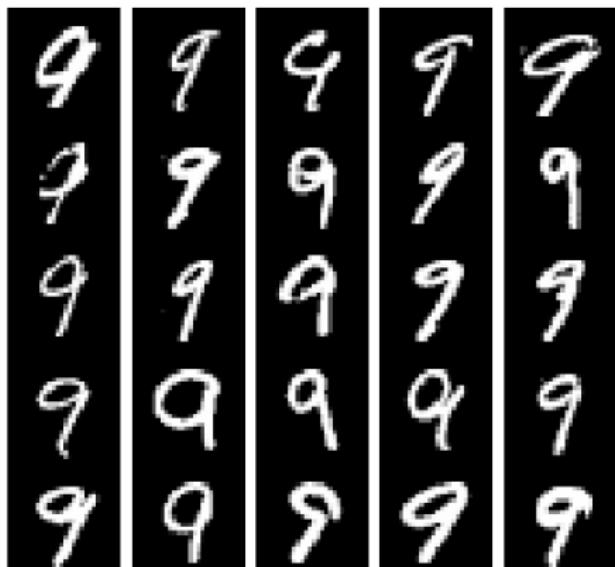


PPCA - Reconstructions

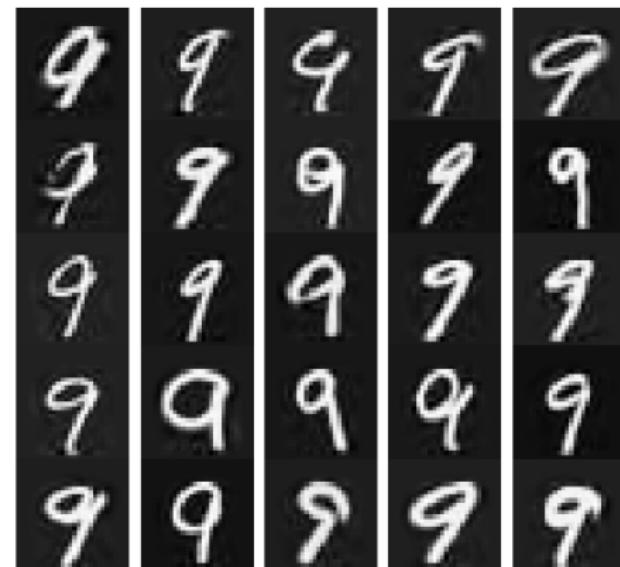


PPCA - Reconstrução MNIST9 ($D = 784$, $L = 128$)

Original samples from class 9

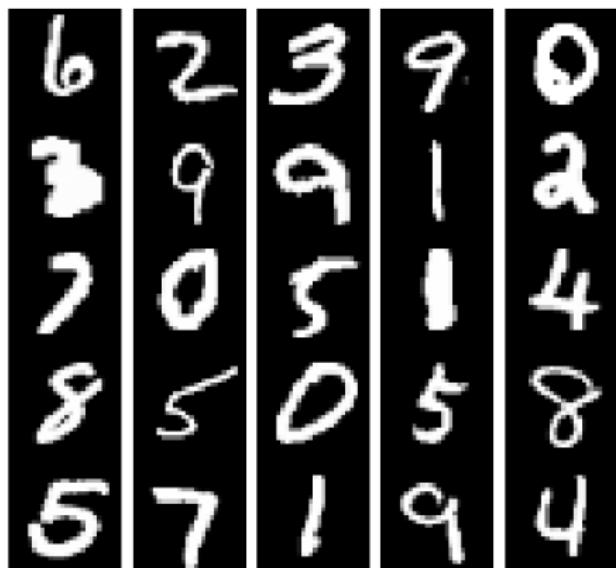


PPCA - Reconstructions

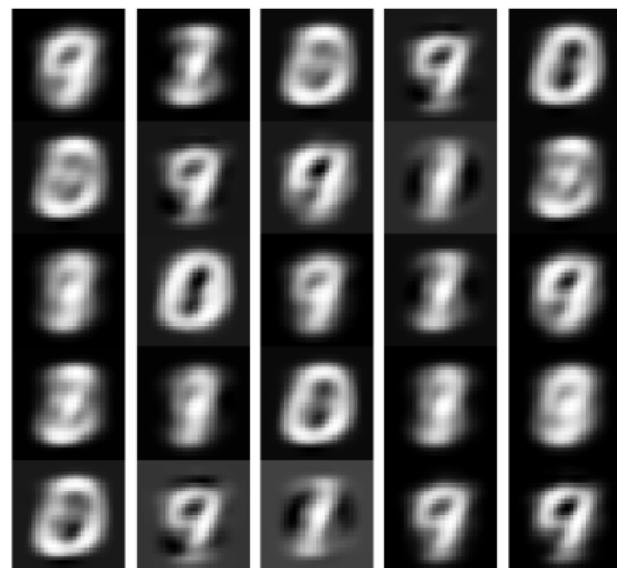


PPCA - Reconstrução MNIST ($D = 784, L = 2$)

Original samples from all classes

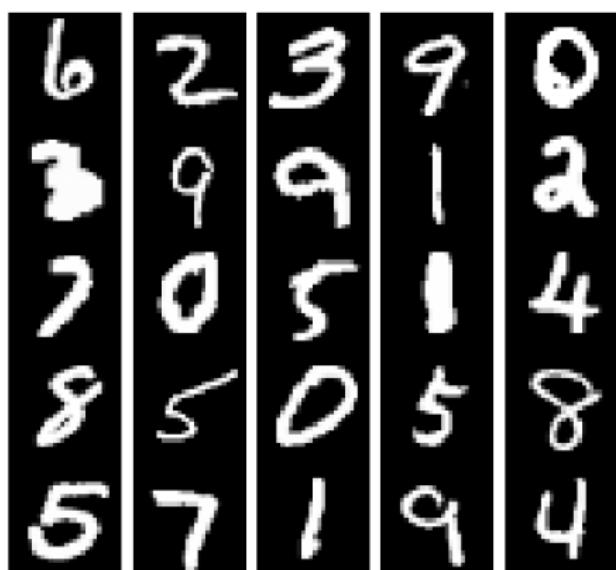


PPCA - Reconstructions

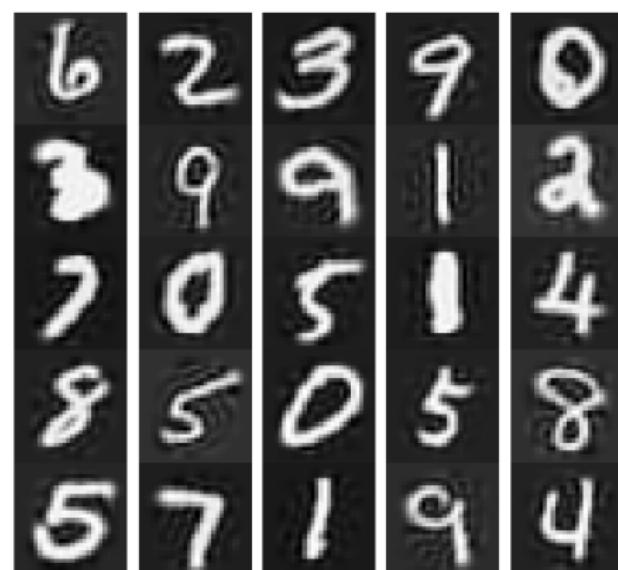


PPCA - Reconstrução MNIST ($D = 784$, $L = 128$)

Original samples from all classes



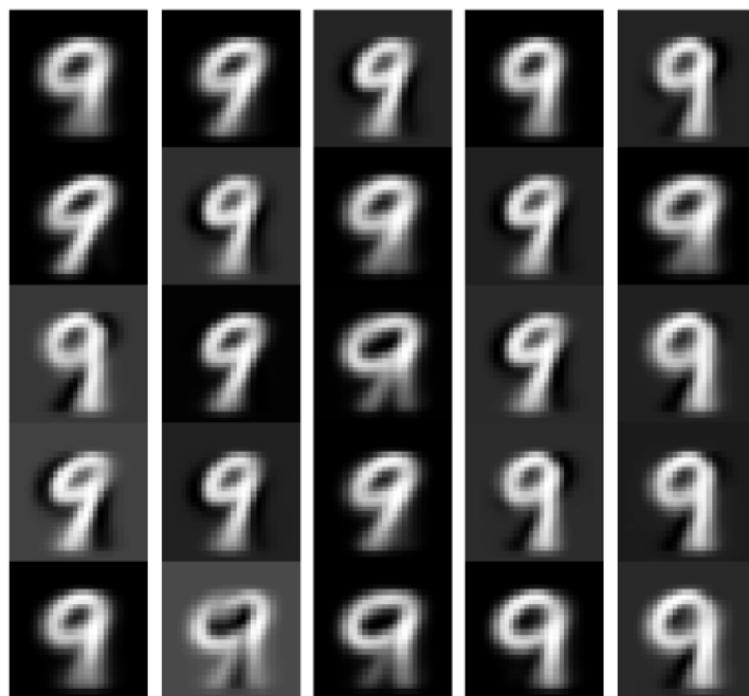
PPCA - Reconstructions



- Maior dimensão latente resulta em melhores reconstruções.

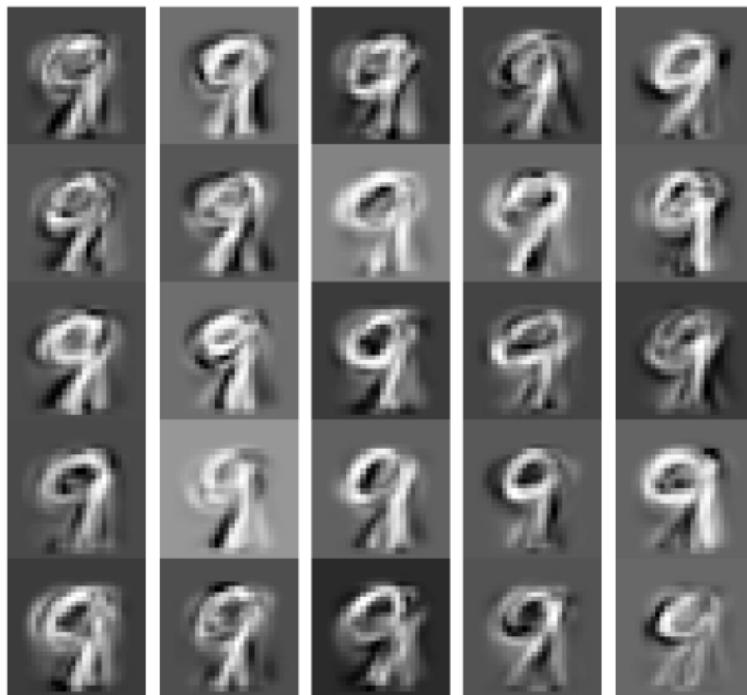
PPCA - Geração MNIST9 ($D = 784, L = 2$)

PPCA - samples from observed space



PPCA - Geração MNIST9 ($D = 784, L = 128$)

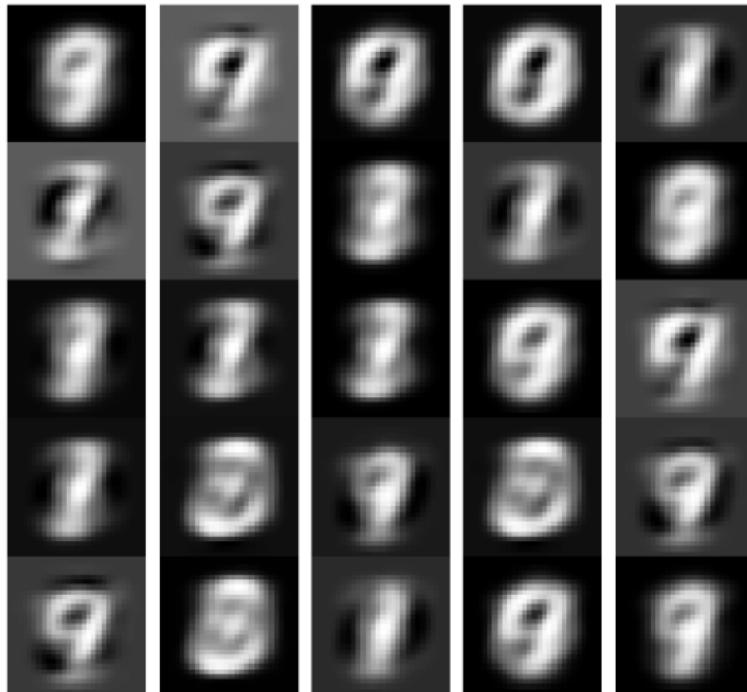
PPCA - samples from observed space



- Maior dimensão latente não implica em melhores amostras!

PPCA - Geração MNIST ($D = 784, L = 2$)

PPCA - samples from observed space



- Ainda é um modelo **generativo linear!**

PCA probabilístico via algoritmo EM

- Apesar da solução analítica para o PPCA, podemos usar o **algoritmo EM**, que possui as seguintes vantagens:
 - É mais rápido para valores altos de N, D , pois evita o cálculo de autovetores e autovalores;
 - Pode ser usado para stream de dados;
 - Pode lidar com dados faltantes;
 - Pode ser estendido para modelos mais complexos (como misturas de PPCA).
- O algoritmo converge para a solução ótima, mas não há a garantia que a matriz W será ortogonal ou possua autovetores em ordem decrescente de autovalores.
- Ambas as características acima podem ser obtidas via pós-processamento.

PCA probabilístico via algoritmo EM

- Começamos escrevendo a **verossimilhança dos dados completos**:

$$\begin{aligned}\log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}, \sigma^2) &= \sum_{i=1}^N [\log p(\mathbf{x}_i | \mathbf{z}_i) + \log p(\mathbf{z}_i)] \\ &= \sum_{i=1}^N [\log \mathcal{N}(\mathbf{x}_i | \mathbf{W}\mathbf{z}_i + \boldsymbol{\mu}, \sigma^2 \mathbf{I}) + \log \mathcal{N}(\mathbf{z}_i | \mathbf{0}, \mathbf{I})] \\ &= - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{D}{2} \log(2\pi\sigma^2) + \frac{L}{2} \log(2\pi) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}\|^2 - \frac{1}{\sigma^2} \mathbf{z}_i^\top \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) + \frac{1}{2\sigma^2} \text{Tr}(\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top \mathbf{W}^\top \mathbf{W}) \right\}.\end{aligned}$$

PCA probabilístico via algoritmo EM

- Para o **passo E**, tomamos a esperança em relação a \mathbf{z}_i :

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}[\log p(\mathbf{X}, \mathbf{Z} | \boldsymbol{\mu}, \mathbf{W}, \sigma^2)] \\ &= - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{D}{2} \log(2\pi\sigma^2) + \frac{L}{2} \log(2\pi) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top]) \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}\|^2 - \frac{1}{\sigma^2} \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) + \frac{1}{2\sigma^2} \text{Tr}(\mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] \mathbf{W}^\top \mathbf{W}) \right\}. \end{aligned}$$

- As quantidades $\mathbb{E}[\mathbf{z}_i]$ e $\mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top]$ podem ser computadas a partir dos parâmetros estimados até a iteração atual:

$$\mathbf{M} = \mathbf{W}^\top \mathbf{W} + \sigma^2 \mathbf{I},$$

$$p(\mathbf{z}_i | \mathbf{x}_i) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_i | \mathbf{M}^{-1} \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}), \sigma^2 \mathbf{M}^{-1}),$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}_i] = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}),$$

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] = \text{cov}[\mathbf{z}_i] + \mathbb{E}[\mathbf{z}_i] \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top = \sigma^2 \mathbf{M}^{-1} + \mathbb{E}[\mathbf{z}_i] \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top,$$

em que omitiu-se o índice $(t-1)$ dos parâmetros $\mathbf{W}, \boldsymbol{\mu}, \sigma^2$.

PCA probabilístico via algoritmo EM

- No **passo M** fazemos novas estimativas para os parâmetros a partir da otimização da expressão obtida no **passo E** (calculando o gradiente e igualando a zero):

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i, \\ \mathbf{W} &= \left[\sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top \right] \left[\sum_{i=1}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] \right]^{-1}, \\ \sigma^2 &= \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^N \left\{ \|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}\|^2 - 2\mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \right. \\ &\quad \left. + \text{Tr}(\mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] \mathbf{W}^\top \mathbf{W}) \right\},\end{aligned}$$

em que omitiu-se o índice t dos parâmetros atualizados.

- Note que o parâmetro $\boldsymbol{\mu}$ não depende das variáveis latentes, sendo constante ao longo das iterações.

PCA probabilístico via algoritmo EM

PPCA via algoritmo EM

- ① Inicialize os parâmetros $\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i$, $\mathbf{W}^{(0)}$, $(\sigma^2)^{(0)}$.
Escalar
- ② Repita até convergir:

- ① Passo E (índices das iterações omitidos):

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\mathbf{z}_i] &= \mathbf{M}^{-1} \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}), \quad \mathbf{M} = \mathbf{W}^\top \mathbf{W} + \sigma^2 \mathbf{I}, \\ \mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] &= \sigma^2 \mathbf{M}^{-1} + \mathbb{E}[\mathbf{z}_i] \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top.\end{aligned}$$

- ② Passo M (índices das iterações omitidos):

$$\mathbf{W} = \left[\sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top \right] \left[\sum_{i=1}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] \right]^{-1},$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^N \left\{ \|\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}\|^2 - 2\mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top \mathbf{W}^\top (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}) + \text{Tr}(\mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] \mathbf{W}^\top \mathbf{W}) \right\}.$$

- Projeção linear probabilística dos dados:

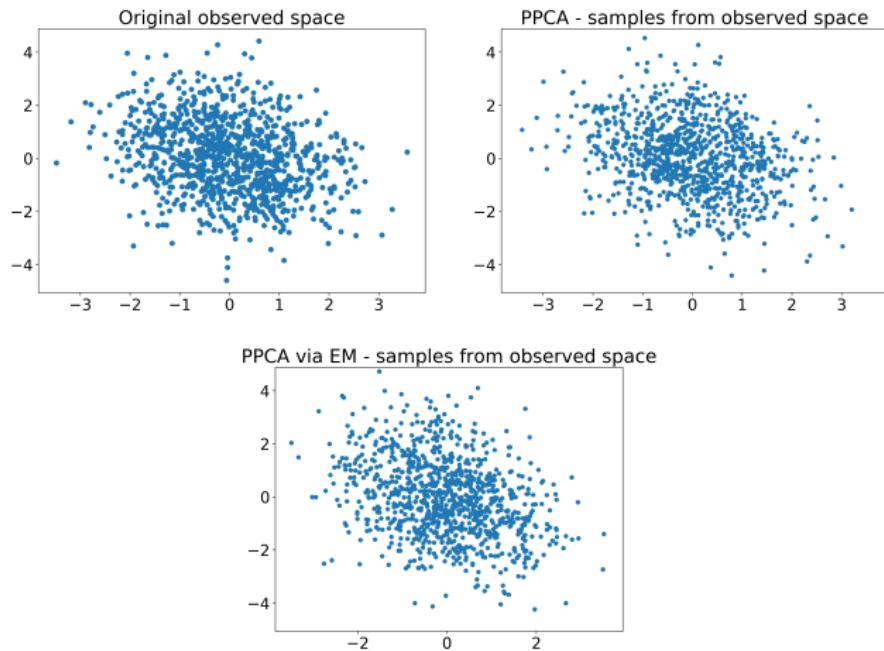
$$p(\mathbf{z}_i | \mathbf{x}_i) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_i | \hat{\mathbf{M}}^{-1} \hat{\mathbf{W}}^\top (\mathbf{x}_i - \hat{\boldsymbol{\mu}}), \hat{\sigma}^2 \hat{\mathbf{M}}^{-1}).$$

- Reconstrução probabilística das projeções:

$$p(\mathbf{x}_i | \mathbf{z}_i) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_i | \hat{\mathbf{W}} \mathbf{z}_i + \hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\sigma}^2 \mathbf{I}).$$

PCA probabilístico via algoritmo EM

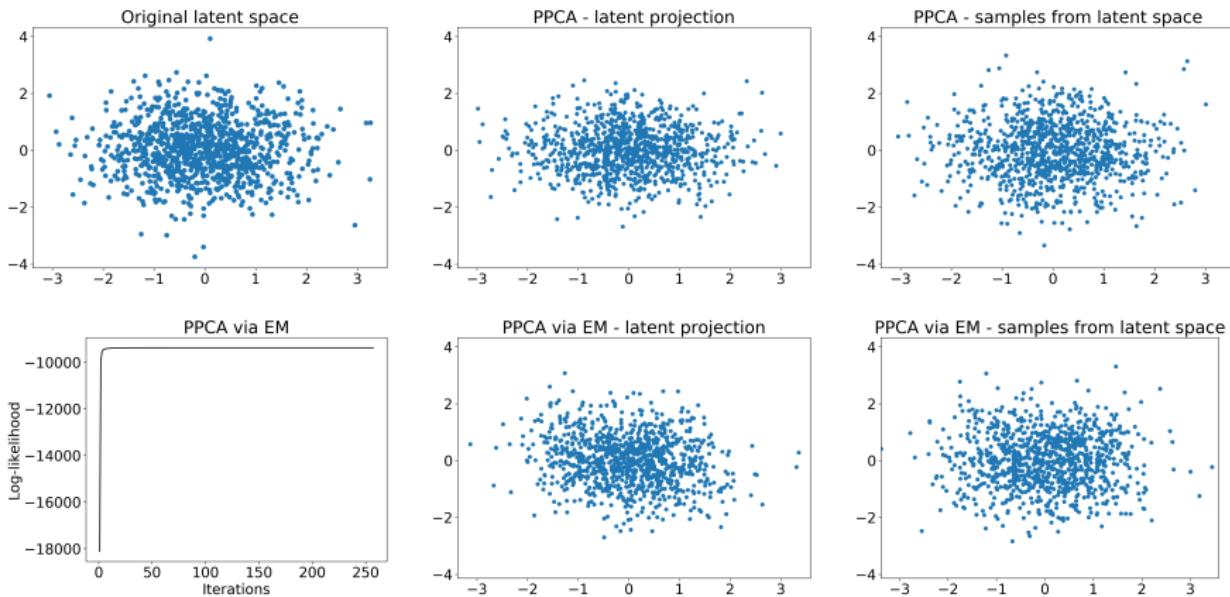
$D = 2, L = 1$



$$W = \begin{bmatrix} -0.40941532 \\ 0.95788668 \end{bmatrix}, \quad \hat{W} = \begin{bmatrix} -0.42237625 \\ 0.95572549 \end{bmatrix}, \quad \hat{W}_{EM} = \begin{bmatrix} -0.422165 \\ 0.95524748 \end{bmatrix}$$

PCA probabilístico via algoritmo EM

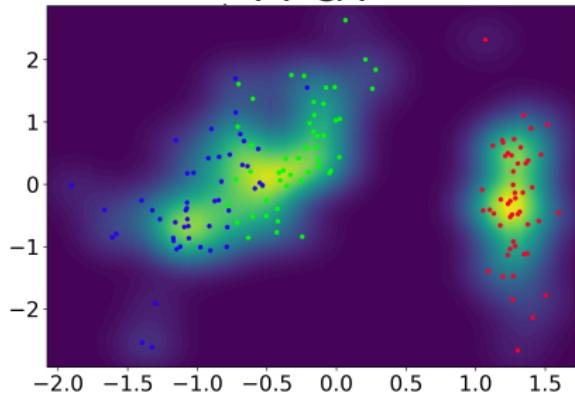
$D = 5, L = 2$



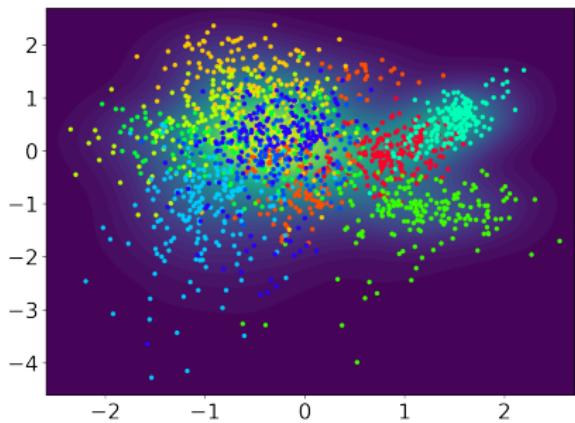
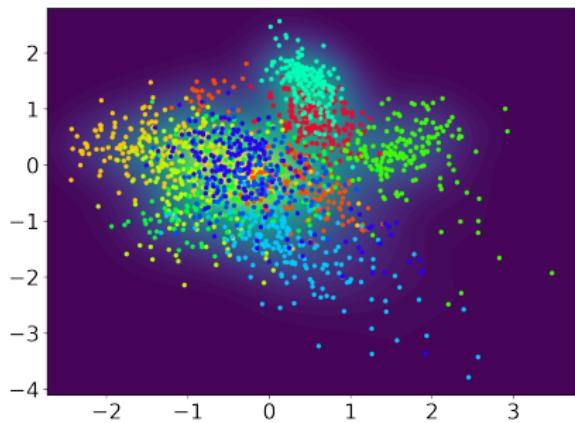
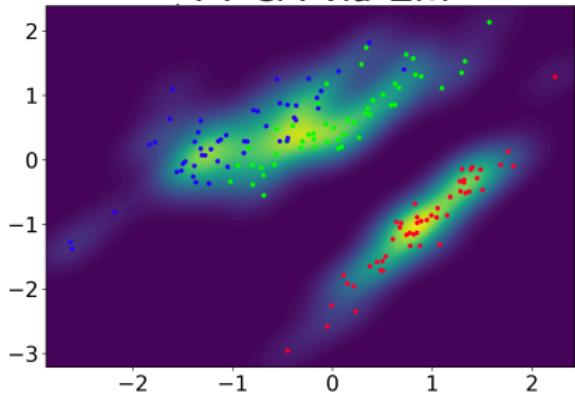
Importante: A estimação via algoritmo EM não garante uma matriz de projeção ortogonal, com eixos ortonormais!

PCA probabilístico via algoritmo EM - Iris e Digits

PPCA



PPCA via EM



Agenda

① Algoritmo PCA probabilístico

Solução analítica

Solução via algoritmo EM

② Análise fatorial

③ Tópicos adicionais

④ Referências

Análise fatorial

- O método de análise fatorial (*factor analysis*) corresponde ao PPCA com variâncias para cada dimensão da variável observada.
- A covariância da verossimilhança dos dados passa a ser uma **matriz diagonal Ψ** ($D \times D$), em vez de uma **matriz isotrópica $\sigma^2 I$** :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{x} | \mathbf{W}\mathbf{z} + \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Psi}).$$

- As colunas da matriz \mathbf{W} são chamadas de “**cargas fatoriais**” (*factor loadings*).
- Os valores na diagonal de $\boldsymbol{\Psi}$ são chamados de “**especificidades**” (*uniquenesses*).
- Não há uma solução analítica para todos os parâmetros, mas podemos estimá-los via **algoritmo EM**, semelhante ao PPCA.

Análise factorial

Análise factorial via algoritmo EM

- ① Inicialize os parâmetros $\mu = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i$, $\mathbf{W}^{(0)}$, $\Psi^{(0)}$.
- ② Repita até convergir:

- ① Passo E (índices das iterações omitidos):

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\mathbf{z}_i] &= \mathbf{G} \mathbf{W}^\top \Psi^{-1} (\mathbf{x}_i - \mu), \quad \mathbf{G} = (\mathbf{W}^\top \Psi^{-1} \mathbf{W} + \mathbf{I})^{-1}, \\ \mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] &= \mathbf{G} + \mathbb{E}[\mathbf{z}_i] \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top.\end{aligned}$$

- ② Passo M (índices das iterações omitidos):

$$\mathbf{W} = \left[\sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \mu) \mathbb{E}[\mathbf{z}_i]^\top \right] \left[\sum_{i=1}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_i \mathbf{z}_i^\top] \right]^{-1},$$

$$S = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{x}_i - \mu) (\mathbf{x}_i - \mu)^\top, \quad \Psi = \text{diag} \left[S - \mathbf{W} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbb{E}[\mathbf{z}_i] (\mathbf{x}_i - \mu)^\top \right].$$

- **Projeção linear probabilística dos dados:**

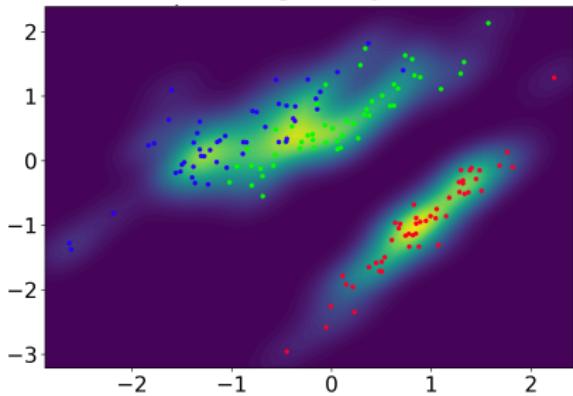
$$p(\mathbf{z}_i | \mathbf{x}_i) = \mathcal{N}(\mathbf{z}_i | \hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{W}}^\top \hat{\Psi}^{-1} (\mathbf{x}_i - \hat{\mu}), \hat{\mathbf{G}}).$$

- **Reconstrução probabilística das projeções:**

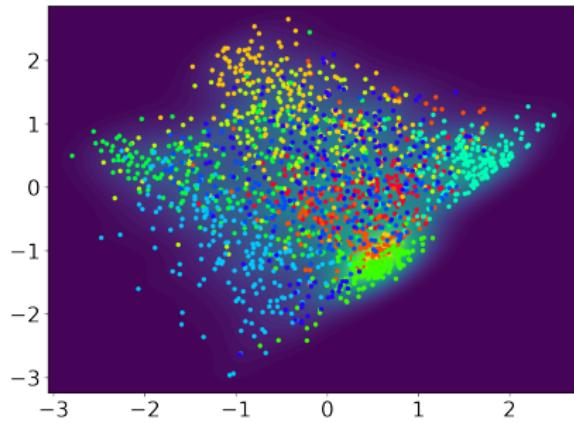
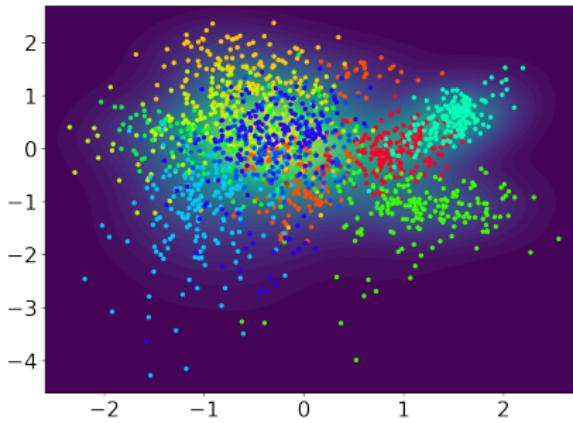
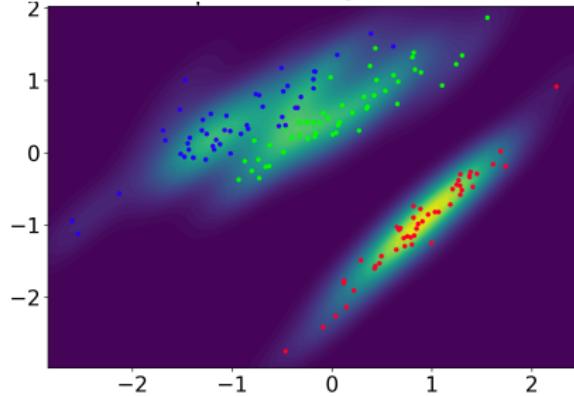
$$p(\mathbf{x}_i | \mathbf{z}_i) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_i | \hat{\mathbf{W}} \mathbf{z}_i + \hat{\mu}, \hat{\Psi}).$$

Análise fatorial via algoritmo EM - Iris e Digits

PPCA via EM

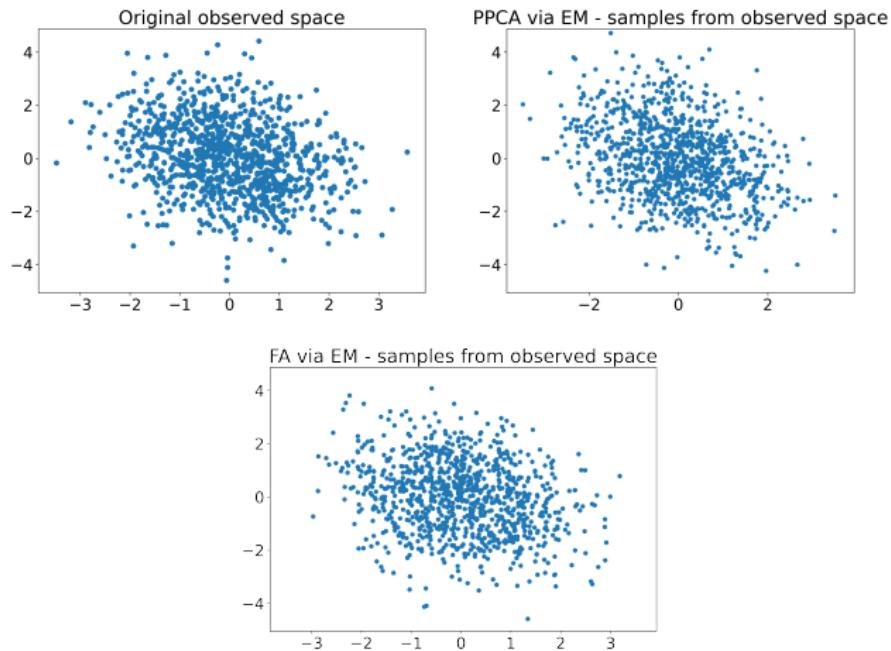


FA via EM



Análise fatorial via algoritmo EM

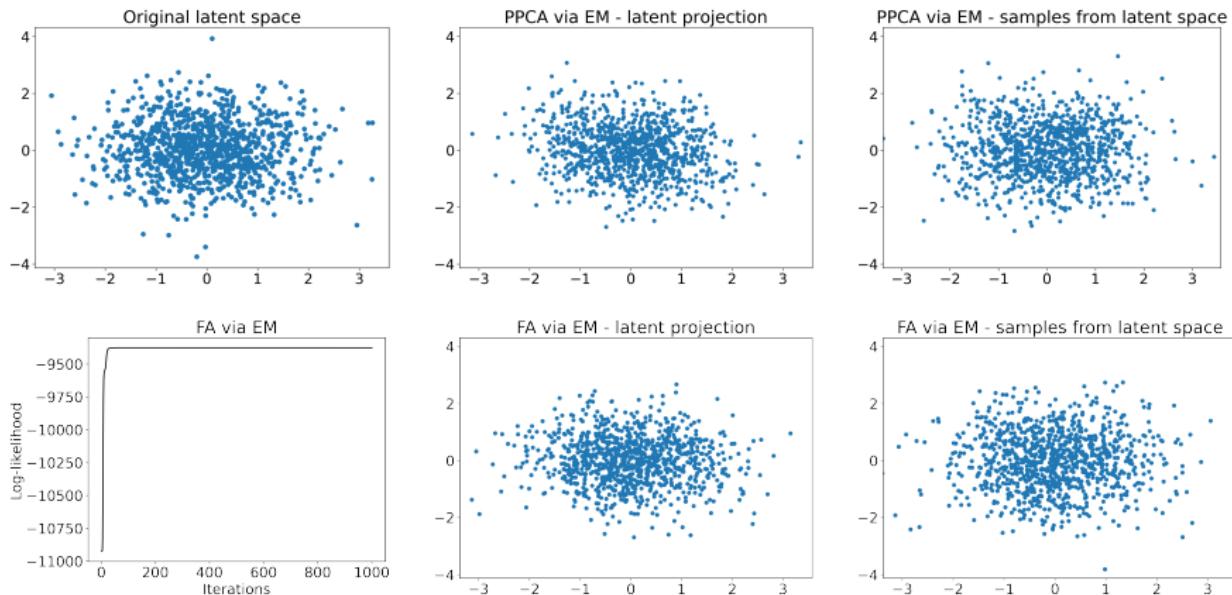
$D = 2, L = 1$



$$W = \begin{bmatrix} -0.40941532 \\ 0.95788668 \end{bmatrix}, \quad \hat{W}_{\text{PPCA}} = \begin{bmatrix} -0.422165 \\ 0.95524748 \end{bmatrix}, \quad \hat{W}_{\text{FA}} = \begin{bmatrix} 0.56282318 \\ -0.71379428 \end{bmatrix}$$

Análise factorial via algoritmo EM

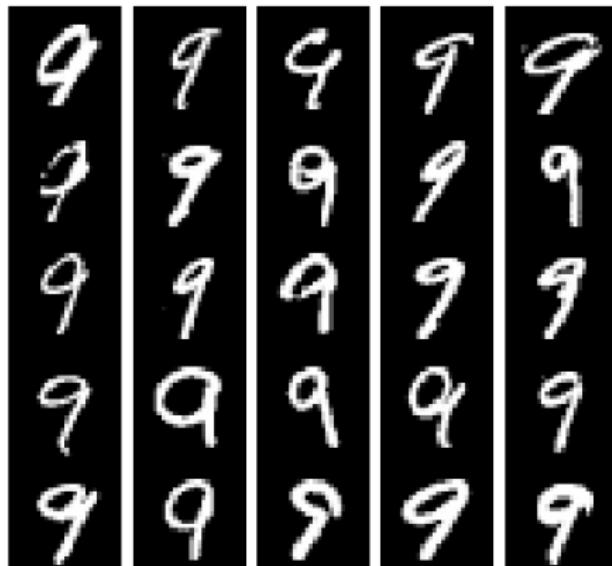
$$D = 5, L = 2$$



Importante: Lembre que o modelo FA difere do PPCA por permitir variâncias independentes para os ruídos das dimensões observadas.

FA - Reconstrução MNIST9 ($D = 784, L = 2$)

Original samples from class 9

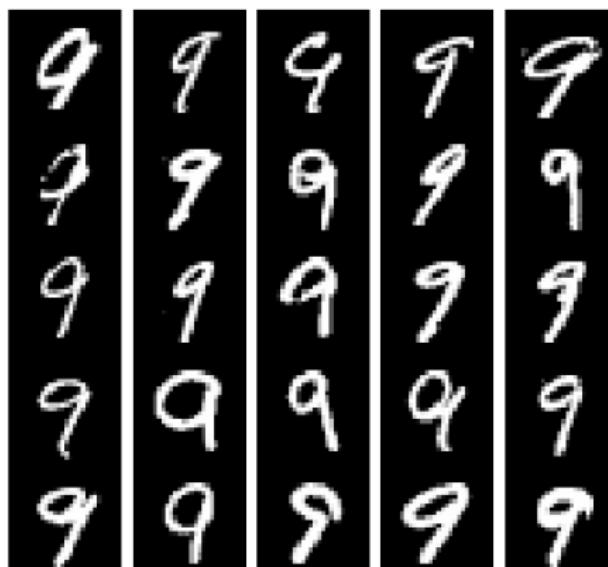


FA with EM - Reconstructions

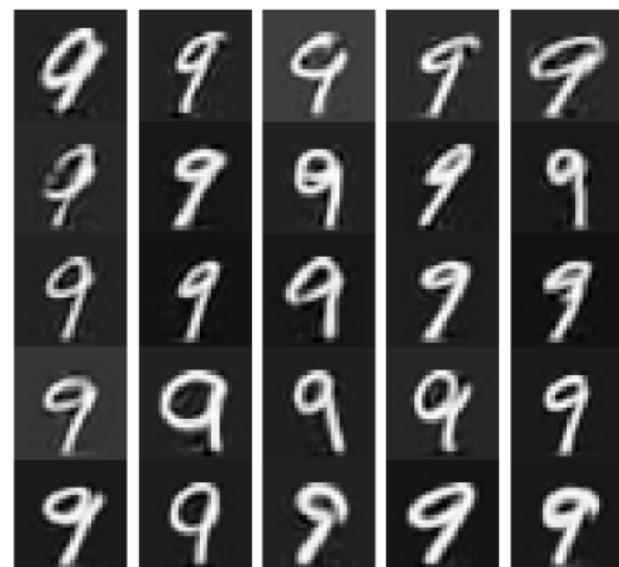


FA - Reconstrução MNIST9 ($D = 784$, $L = 128$)

Original samples from class 9



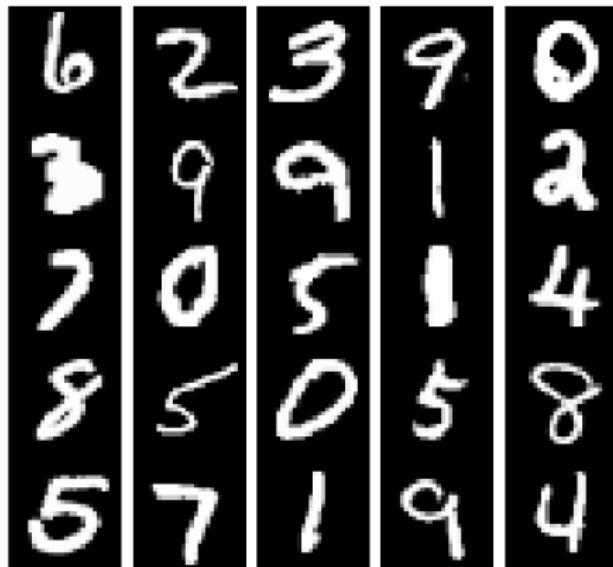
FA with EM - Reconstructions



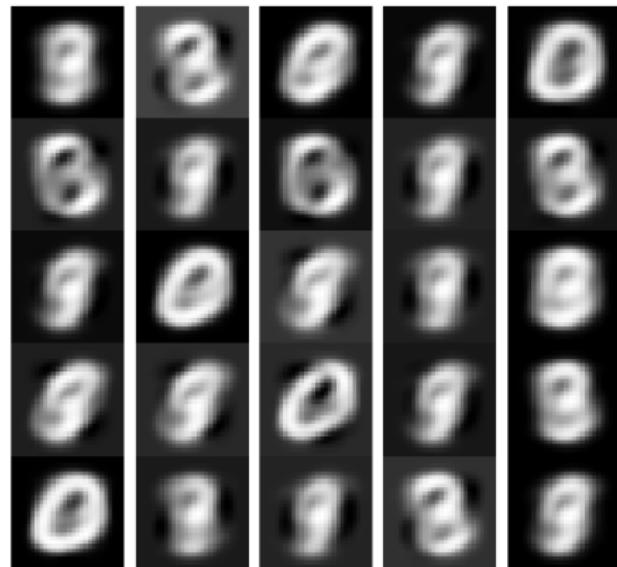
- Maior dimensão latente resulta em melhores reconstruções.

FA - Reconstrução MNIST ($D = 784, L = 2$)

Original samples from all classes

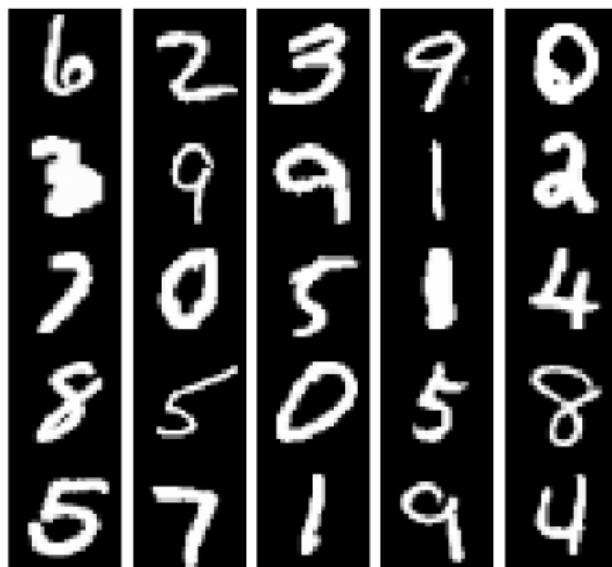


FA with EM - Reconstructions



FA - Reconstrução MNIST ($D = 784$, $L = 128$)

Original samples from all classes



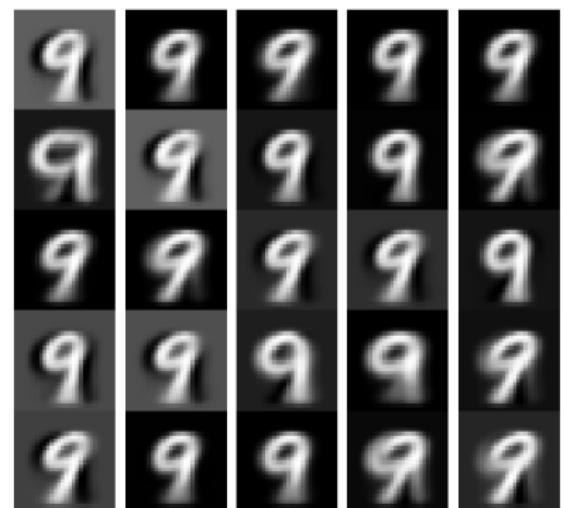
FA with EM - Reconstructions



- Maior dimensão latente resulta em melhores reconstruções.

PPCA e FA - Geração MNIST9 $D = 784, L = 2$

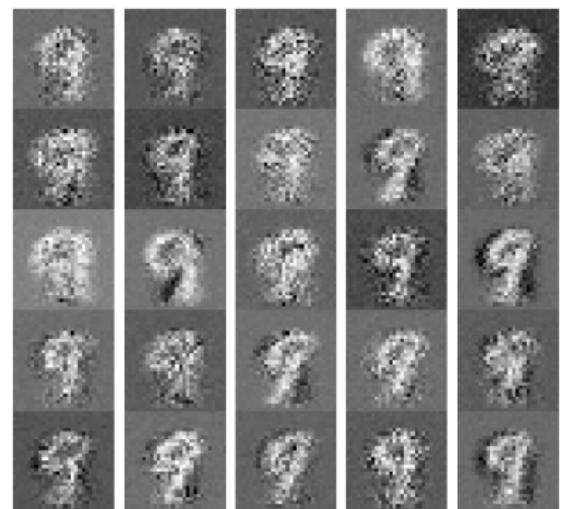
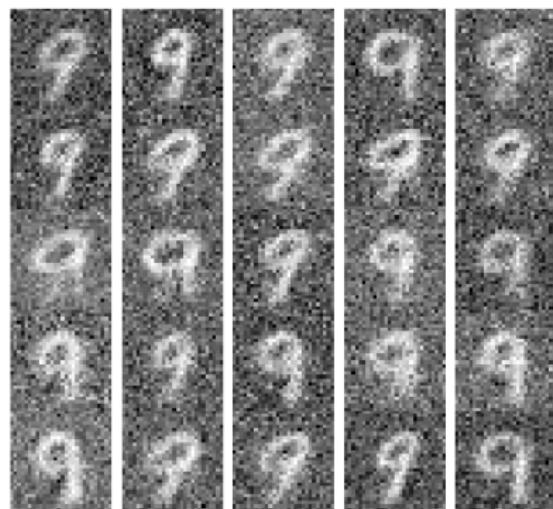
PPCA with EM - samples from observed space FA with EM - samples from observed space



PPCA e FA - Geração MNIST9 (com ruído)

$D = 784, L = 2$

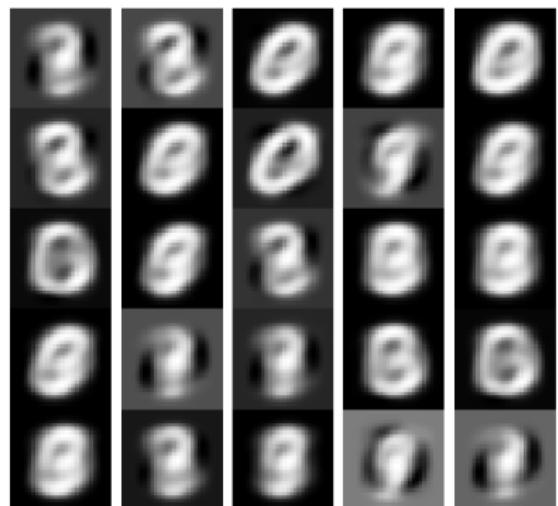
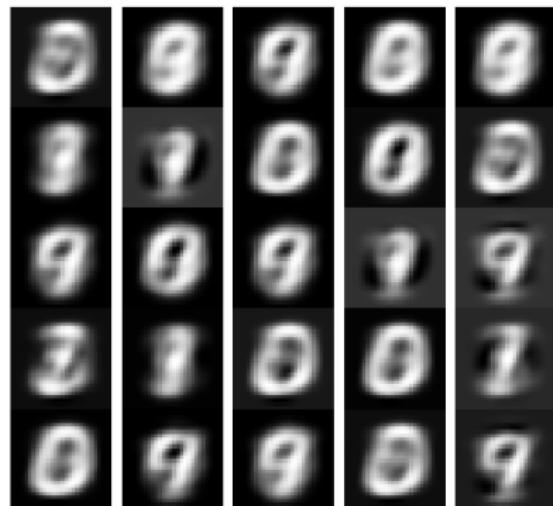
PPCA with EM - samples from observed space FA with EM - samples from observed space



- O modelo FA é capaz de determinar variâncias de ruído diferentes para cada dimensão.

PPCA e FA - Geração MNIST $D = 784, L = 2$

PPCA with EM - samples from observed space FA with EM - samples from observed space

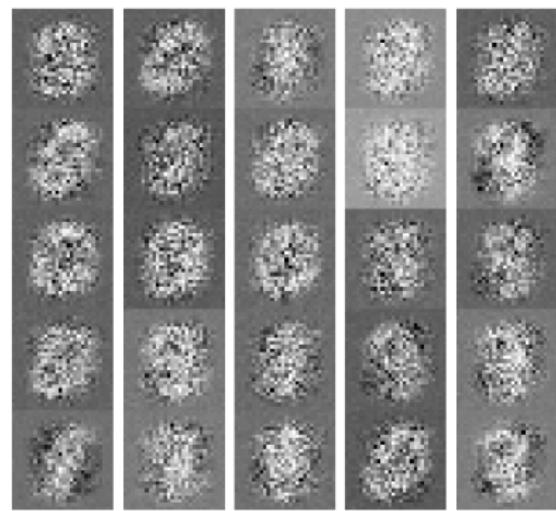
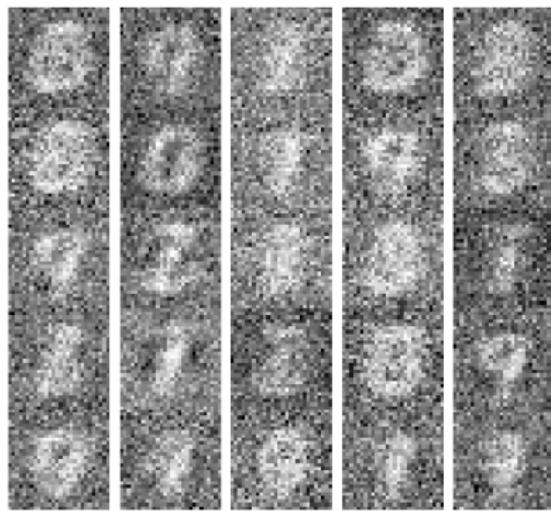


- Ainda é um modelo **generativo linear!**

PPCA e FA - Geração MNIST (com ruído)

$D = 784, L = 2$

PPCA with EM - samples from observed space FA with EM - samples from observed space



- Ainda é um modelo **generativo linear!**

Agenda

① Algoritmo PCA probabilístico

Solução analítica

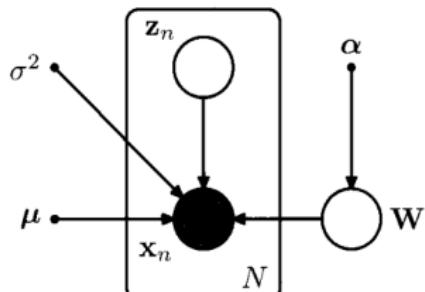
Solução via algoritmo EM

② Análise fatorial

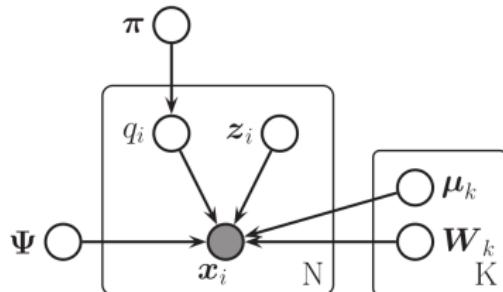
③ Tópicos adicionais

④ Referências

Tópicos adicionais



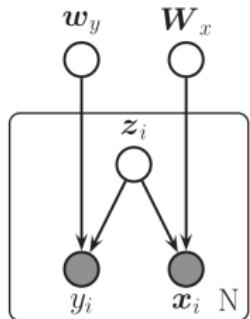
PCA Bayesiano



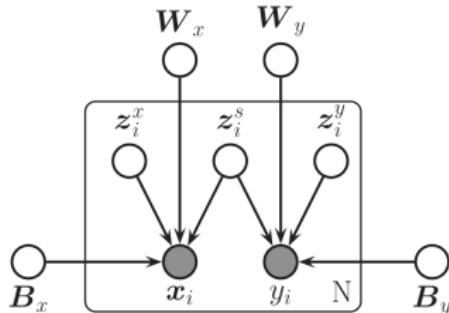
Mistura de modelos FA

- Modelo PCA para dados categóricos.
- Modelos de misturas de PCA.
- Modelos de misturas de componentes de análise fatorial.
- Modelo PCA Bayesiano.
 - Marginalização dos parâmetros da transformação linear.
- Modelo Kernel PCA.
 - O truque do kernel permite a construção de variantes não-lineares.

Tópicos adicionais



PCA supervisionado

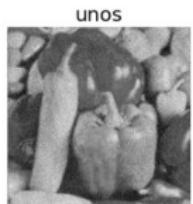
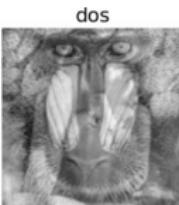
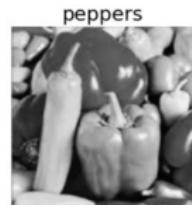


Canonical Correlation Analysis

- Modelo PCA supervisionado:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}) &= \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}), \\ p(y|\mathbf{z}) &= \mathcal{N}(\mathbf{w}_y^\top \mathbf{z} + \mu_y, \sigma_y^2), \\ p(\mathbf{x}|\mathbf{z}) &= \mathcal{N}(\mathbf{W}_x \mathbf{z} + \boldsymbol{\mu}_x, \sigma_x^2 \mathbf{I}). \end{aligned}$$

Tópicos adicionais



<https://github.com/vishwajeet97/Cocktail-Party-Problem>

- Análise de Componentes Independentes (ICA).
 - Priori latente fatorada e não-Gaussianas (deixa de ser invariante à rotação): $p(z) = \prod_j p(z_j)$.
 - “Cocktail party problem”.

Agenda

① Algoritmo PCA probabilístico

Solução analítica

Solução via algoritmo EM

② Análise fatorial

③ Tópicos adicionais

④ Referências

Referências bibliográficas

- Cap. 12 - MURPHY, Kevin P. **Machine learning: a probabilistic perspective**, 2012.
- Cap. 12 - BISHOP, Christopher M. **Pattern recognition and machine learning**, 2006.
- Caps. 15 e 21 - BARBER, D. **Bayesian reasoning and machine learning**, 2012.