Download notebook

Temel Bileşen Analizi (Principal Component Analysis -PCA-)

PCA yontemi boyut azaltan yontemlerden biridir, takip edilmeden (unsupervised) isleyebilir. Ana fikir veri noktalarinin izdusumunun yapilacagi yonler bulmaktir ki bu yonler baglaminda (izdusum sonrasi) noktalarin arasindaki varyans (variance) en fazla olsun, yani noktalar en "yaygin" sekilde bulunsunlar. Boylece birbirinden daha uzaklasan noktalarin mesela daha rahat kumelenebilecegini umabiliriz. Yani bir diger amac hangi degiskenlerin varyansinin daha fazla olmasinin gorulmesi uzerine, o degiskenlerin daha onemli olabileceginin anlasilmasi. Ornek olarak alttaki grafige bakalim,

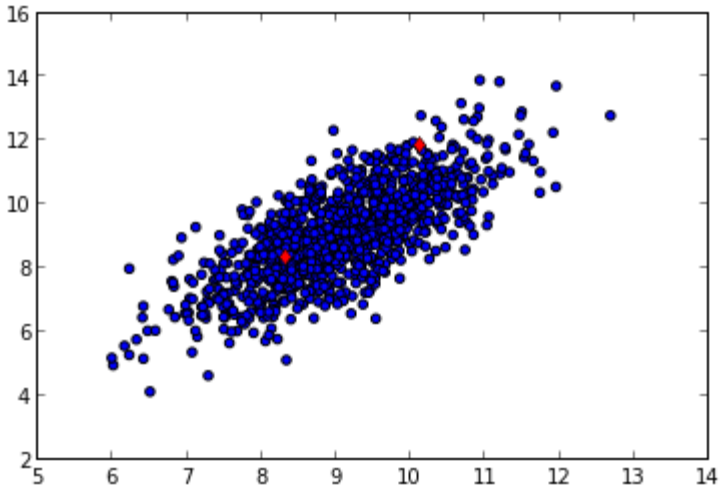
In [15]:
```
from pandas import *
data = read_csv("testSet.txt",sep="\t",header=None)
data[:10]
```

Out[15]:

	0	1
0	10.235186	11.321997
1	10.122339	11.810993
2	9.190236	8.904943
3	9.306371	9.847394
4	8.330131	8.340352
5	10.152785	10.123532
6	10.408540	10.821986
7	9.003615	10.039206
8	9.534872	10.096991
9	9.498181	10.825446

In [47]:
```
scatter(data.ix[:,0],data.ix[:,1])
plot(data.ix[1,0],data.ix[1,1],'rd')
plot(data.ix[4,0],data.ix[4,1],'rd')
```

Out[47]:
```
[<matplotlib.lines.Line2D at 0xb52880c>]
```

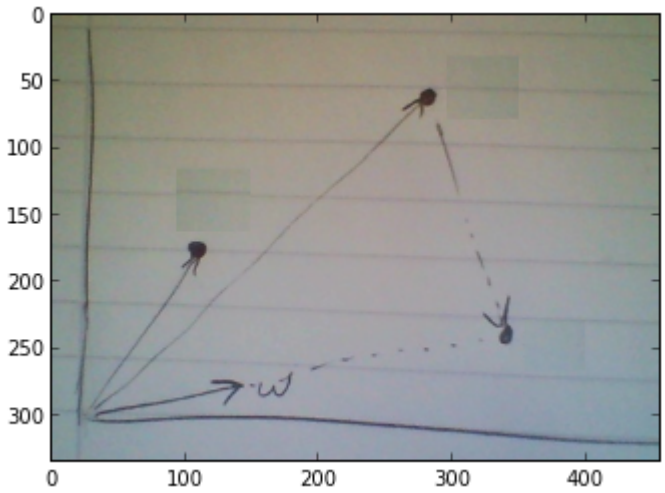


PCA ile yapmaya calistigimiz oyle bir yon bulmak ki, x veri noktalarinin tamaminin o yone izdusumu yapilinca sonuc olacak, "izdusumu yapilmis" z'nin varyansi en buyuk olsun. Bu bir maksimizasyon problemidir. Fakat ondan once x nedir, z nedir bunlara yakindan bakalim.

Veri x ile tum veri noktalari kastedilir, fakat PCA probleminde genellikle bir "vektorun digeri uzerine" yapilan izdusumu, "daha optimal bir w yonu bulma", ve "o yone dogru izdusum yapmak" kelimeleri kullanilir. Demek ki veri noktalarini bir vektor olarak gormeliyiz. Eger ustte kirmizi ile isaretlenen iki noktayi alirsak (bu noktalar verideki 1. ve 4. siradaki noktalar),

In [1]:
```
img=imread("proj1.png")
plt.imshow(img)
```

Out[1]:
```
<matplotlib.image.AxesImage at 0xa9e5e2c>
```



gibi bir goruntuden bahsediyoruz. Hayali bir w kullandik, ve noktalardan biri veri noktasi, w uzerine izdusum yapilarak yeni bir vektoru / noktayi ortaya cikartiyor. Genel olarak ifade edersek, bir nokta icin

$$z = w^T x$$

Yapmaya calistigimiz varyansi maksimize etmek demistik. Ozel bir izdusum yonunu referans alirsak, en buyuk

$Var(z_1)$'i bulacagiz. Not: Bunu soyler soylemez x'i ve z'yi rasgele degiskenler olarak gordugumuzu belirtmis oluyoruz. Ardi ardina alet cantasindan temsili numaralari kullaniyoruz - x'i bir yandan vektor yapiyoruz, bir yandan bir dagilimdan gelen zar atisi gibi goruyoruz, problemi cozmemize ne yardim edecekse onu surekli devreye sokuyoruz. Devam edelim, rasgele degisken deyince, demek ki x, z dagilimlardan gelecektir, bu dagilimlarin cok boyutlu normal (multivariate normal) oldugunu kabul edebiliriz. Peki eger x, $N(\mu, \Sigma)$ gibi cok boyutlu normal dagilimdan geliyorsa, ki μ ortalama ve Σ kovaryanstir, $w^T x$ nedir?

Bu yeni "seyin" beklentisi ve varyansina bakalim,

$$E[w^T x] = w^T E[x] = w^T \mu$$

$$Var(w^T x) = w^T Var(x) w = w^T \Sigma w$$

Ustteki sonuclarin boyutlarina dikkat: $w^T \mu$ durumunda $1 \times N \cdot N \times 1 = 1 \times 1$, $w^T \Sigma w$ durumunda ise $1 \times N \cdot N \times N \cdot N \times 1 = 1 \times 1$. Iki durumda da tek boyutlu skalar degerler elde ettik. Demek ki w^T ile carpim sonrasi bir $N(w^T \mu, w^T \Sigma w)$ dagilimi elde ederiz ve bu dagilim bir tek boyutlu bir dagilimdir. Yani w yonundeki izdusum bize tek boyutlu bir Gaussian dagilimini verecektir. Bu sonuc aslinda cok sasirtici olmasa gerek, tum veri noktalarini alip, baslangici orijin noktasinda olan vektorlere cevirip ayni yone isaret edecek sekilde duzenliyoruz, bu vektorleri tekrar nokta olarak dusunursek, tabii ki ayni yonu gosteriyorlar, bilahere ayni cizgi uzerindeki noktalara donusuyorlar. Ayni cizgi uzerinde olmak ne demek? Tek boyuta inmis olmak demek.

Bastaki amacimiza donersek, $Var(z_1)$'i maksimize etmek ayni anda $Var(w_1^T \Sigma w_1)$'i maksimize etmek demektir.

Ufak bir sorun $w_1^T \Sigma w_1$'i surekli daha buyuk w_1'lerle sonsuz kadar buyutebilirsiniz. Bize ek bir kisitlama sarti daha lazim, bu sart $||w|| = 1$ olabilir, yani w'nin norm'u 1'den daha buyuk olmasin. Boylece optimizasyon w'nin buyuklugu uzerinde taklalar atmayacak, sadece yon bulmak ile ilgilenecek, iyi, zaten biz w'nin yonu ile ilgileniyoruz. Aradigimiz ifadeyi yazalim, ve ek siniri Lagrange ifadesi olarak ekleyelim, ve yeni bir L ortaya cikartalim,

$$L(w_1, \lambda) = w_1^T \Sigma w_1 - \lambda(w_1^T w_1 - 1)$$

Niye eksiden sonraki terim o sekilde eklendi? O terim oyle sekilde secildi ki, $\partial L / \partial \lambda = 0$ alininca $w_1^T w_1 = 1$ geri gelsin / ortaya ciksin [2, sf 340], bu Lagrange'in dahice bulusu. Bunu kontrol edebilirsiniz, λ 'ya gore turev alirken w_1 sabit olarak yokolur, parantez icindeki ifadeler kalir ve sifira esitlenince orijinal kisitlama ifadesi geri gelir. Simdi

$$\max_{w_1} L(w_1, \lambda)$$

Turevi w_1'e gore alirsak, ve sifira esitlersek,

$$2w_1 \Sigma - 2\lambda w_1 = 0$$

$$2w_1 \Sigma = 2\lambda w_1$$

$$\Sigma w_1 = \lambda w_1$$

Ustteki ifade ozdeger, ozvektor ana formulune benzemiyor mu? Evet. Eger w_1, Σ'nin ozvektoru ise ve esitligin sagindaki λ ona tekabul eden ozdeger ise, bu esitlik dogru olacaktir.

Peki hangi ozdeger / ozvektor maksimal degeri verir? Unutmayalim, maksimize etmeye calistigimiz sey $w_1^T \Sigma w_1$ idi

Eger $\Sigma w_1 = \lambda w_1$ yerine koyarsak

$$w_1^T \lambda w_1 = \lambda w_1^T w_1 = \lambda$$

Cunku $w_1^T w$'nin 1 olacagi sartini koymustuk. Neyse, maksimize etmeye calistigimiz deger λ cikti, o zaman en buyuk λ kullanirsak, en maksimal varyansi elde ederiz, bu da en buyuk ozdegerin ta kendisidir.

Demek ki izdusum yapilacak "yon" kovaryans Σ'nin en buyuk ozdegerine tekabul eden ozvektor olarak secilirse, temel bilesenlerden en onemlisini hemen bulmus olacagiz.

Cebirin geri kalani w_2,w_3 icin devam eder, bu turetmenin detaylarini [1] ve [2] gibi kaynaklarda bulabilirsiniz. Fakat ulasilan sonuc en bilesenlerin onem sirasinin aynen ozdegerlerin buyukluk sirasina tekabul ediyor olmasi.

Ornek

Simdi tum bunlari bir ornek uzerinde gorelim. Iki boyutlu ornek veriyi ustte yuklemistik. Simdi veriyi "sifirda ortalayacagiz" yani her kolon icin o kolonun ortalama degerini tum kolondan cikartacagiz. PCA ile islem yaparken tum degerlerin sifir merkezli olmasi gerekiyor.

Daha sonra ozdegerlerini, vektorlerini hesaplayabilmek icin verinin kovaryansini hesaplayacagiz.

In [15]:
```
means = mean(data, axis=0)
meanless_data = data - means
cov_mat = cov(meanless_data, rowvar=0)
eigs,eigv = linalg.eig(mat(cov_mat))
eig_ind = argsort(eigs)
eig_ind
```

Out[15]:
```
array([0, 1])
```

Ustteki sonuc sort sonrasi elde edilen indis degerleri, sort en kucukten en buyuge dogru dizimi yapmistir, en buyuk ozdegerin indisi en sondadir. Raslantisal bir sekilde en buyuk olan deger en sagda cikti ama tersi de olabilirdi, neyse, bu ozdeger, vektorleri ekrana basalim,

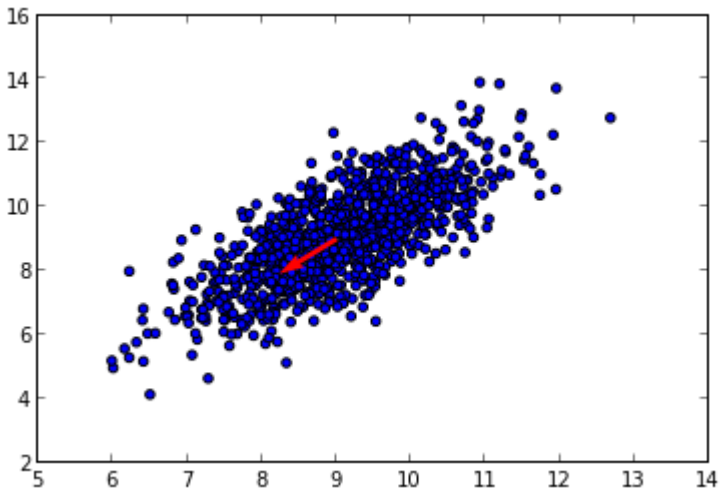
In [34]:
```
print eigs[1],eigv[:,1].T
print eigs[0],eigv[:,0].T
```

```
2.89713495618 [[-0.52045195 -0.85389096]]
0.366513708669 [[-0.85389096  0.52045195]]
```

En buyuk olan yonu quiver komutunu kullanarak orijinal veri seti uzerinde gosterelim,

In [35]:
```
scatter(data.ix[:,0],data.ix[:,1])
quiver(9,9,eigv[1,1],eigv[0,1],scale=10,color='r') # merkez 9,9, kabaca secildi
```

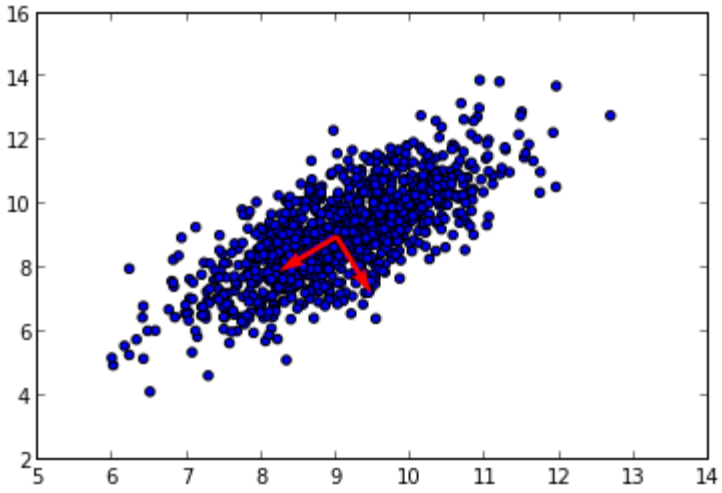
Out[35]:
```
<matplotlib.quiver.Quiver at 0xbb6254c>
```



Goruldugu gibi bu yon hakikaten dagilimin, veri noktalarinin en cok yayilmis oldugu yon. Demek ki PCA yontemi dogru sonucu buldu. Her iki yonu de cizersek,

In [36]:
```
scatter(data.ix[:,0],data.ix[:,1])
quiver(9,9,eigv[1,0],eigv[0,0],scale=10,color='r')
quiver(9,9,eigv[1,1],eigv[0,1],scale=10,color='r')
```

Out[36]: <matplotlib.quiver.Quiver at 0xc194c6c>



Bu ikinci yon birinciye dik olmaliydi, ve o da bulundu. Aslinda iki boyut olunca baska secenek kalmiyor, 1. yon sonrasi ikincisi baska bir sey olamazdi, fakat cok daha yuksek boyutlarda en cok yayilimin oldugu ikinci yon de dogru sekilde geri getirilecekti.

[1] Alpaydin, E., Introduction to Machine Learning, 2nd Edition

[2] Strang, G., Linear Algebra and Its Applications, 4th Edition

[3] http://www.stat.columbia.edu/~fwood/Teaching/w4315/Spring2010/PCA/slides.pdf