

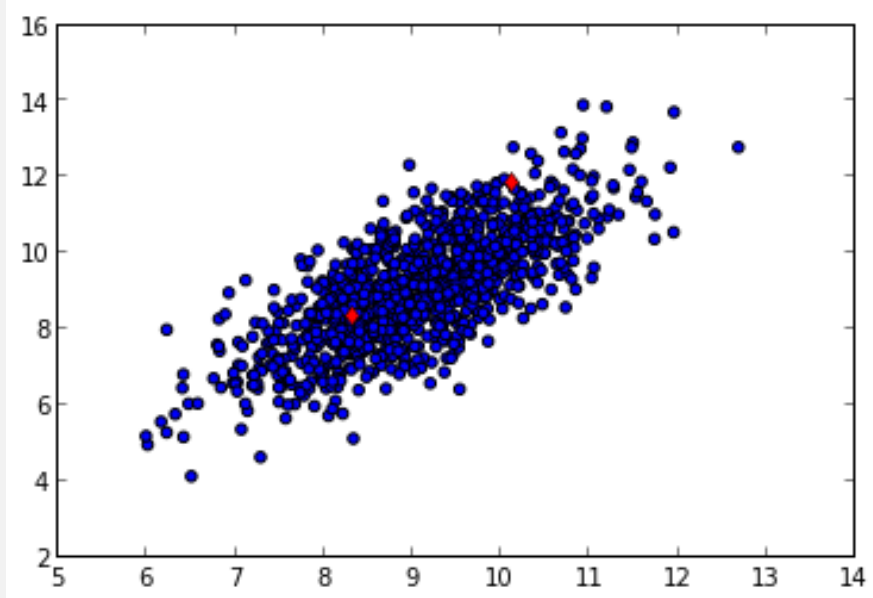
Temel Bileşen Analizi (Principal Component Analysis -PCA-) PCA yöntemi boyut azaltan yöntemlerden biridir, takip edilmeden (unsupervised) işleyebilir. Ana fikir veri noktalarının izdüşümünün yapılacağı yonlar bulmaktır ki bu yonlar bağlamında (izdüşüm sonrası) noktaların arasındaki varyans (variance) en fazla olsun, yani noktalar en “yaygın” şekilde bulunsunlar. Böylece birbirinden daha uzaklaşan noktaların mesela daha rahat kümelenebileceğini umabiliriz. Yani bir diğer amaç hangi değişkenlerin varyansının daha fazla olmasının görülmesi üzerine, o değişkenlerin daha önemli olabileceğinin anlaşılması. Örnek olarak alttaki grafiğe bakalım,

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

	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

```
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')
```

[<matplotlib.lines.Line2D at 0xb52880c>]

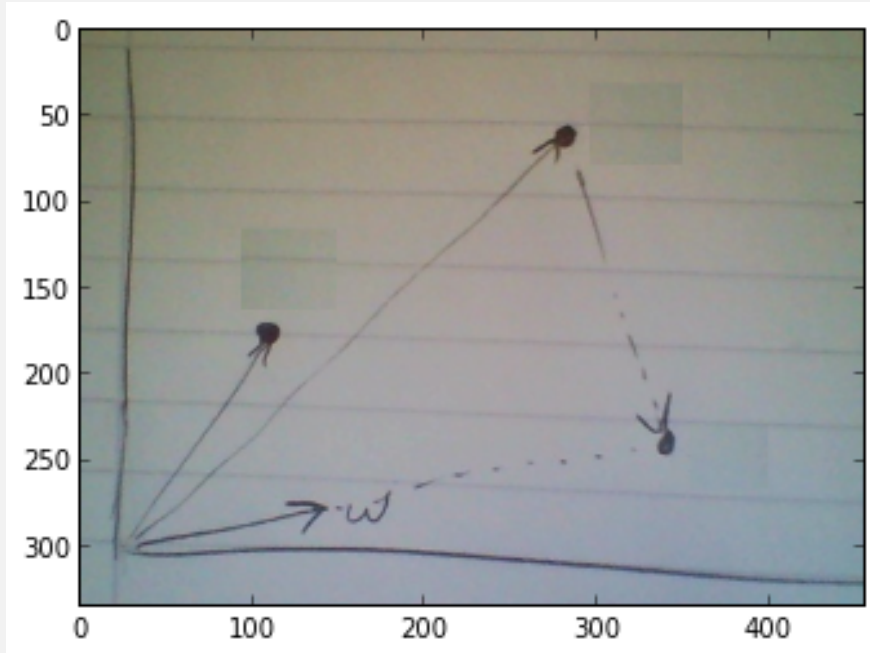


PCA ile yapmaya calistigimiz oyle bir yon bulmak ki,  $x$  veri noktalarinin tamaminin o yone izdusumu yapilince sonuc olacak, “izdusumu yapilmis”  $z$ ’nin varyansi en buyuk olsun. Bu bir maksimizasyon problemidir. Fakat ondan once  $x$  nedir,  $z$  nedir bunlara yakindan bakalim.

Veri  $x$  ile tum veri noktaları kastedilir, fakat PCA probleminde genellikle bir “vektorun digerı uzerine” yapılan izdusumu, “daha optimal bir  $w$  yonu bulma”, ve “o yone dogru izdusum yapmak” kelimeleri kullanilir. Demek ki veri noktalarını bir vektor olarak gormeliyiz. Eger ustte kirmizi ile isaretlenen iki noktayı alirsak (bu noktalar verideki 1. ve 4. siradaki noktalar),

```
img=imread("proj1.png")
plt.imshow(img)
```

<matplotlib.image.AxesImage at 0xa9e5e2c>



gibi bir görüntüden bahsediyoruz. Hayali bir  $w$  kullandık, ve noktalardan biri veri noktası,  $w$  üzerine izdusum yapılarak yeni bir vektörü / noktayı ortaya cikartiyor. Genel olarak ifade edersek, bir nokta için

$$z = w^T x$$

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 yapıyoruz, bir yandan bir dagilimdan gelen zar atisi gibi goruyoruz, problemi cozmemize ne yardım edecekse onu surekli devreye sokuyoruz. Devam edelim, rasgele degisken deyince, demek ki  $x, z$  dagilimlardan gelecektir, bu dagilimların çok boyutlu normal (multivari-

ate normal) oldugunu kabul edebiliriz. Peki eger  $x$ ,  $N(\mu, \Sigma)$  gibi cok boyutlu normal dagilimdan geliyorsa, ki  $\mu$  ortalama ve  $\Sigma$  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 boyutlarına 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 aslında cok sasirtici olmasa gerek, tum veri noktalarını alip, baslangici orijin noktasında olan vektorlere cevrip ayni yone isaret edecek sekilde duzenliyoruz, bu vektorleri tekrar nokta olarak dusunursek, tabii ki ayni yonu gosteriyorlar, bilahere ayni cizgi üzerindeki noktalara donusuyorlar. Ayni cizgi üzerinde 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 üzerinde taklalar atmayacak, sadece yon bulmak ile ilgilenicek, 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,  $\partial L / \partial \lambda = 0$  alinince  $w_1^T w_1 = 1$  geri gelsin / ortaya ciksin [2, sf 340], bu Lagrange’in dahice bulusu. Bunu kontrol edebilirsiniz,  $\lambda$  ’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  $w_1$ ,  $\Sigma$ 'nin ozvektoru ise ve esitligin sagindaki  $\lambda$  ona tekabul eden ozdeger ise, bu esitlik dogru olacaktır.

Peki hangi ozdeger / ozvektor maksimal degeri verir? Unutmayalım, 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  $w_1^T w_1$ 'nin 1 olacagi sartini koymustuk. Neyse, maksimize etmeye calistigimiz deger  $\lambda$  cikti, o zaman en buyuk  $\lambda$  kullanirsak, en maksimal varyansi elde ederiz, bu da en buyuk ozdegerin ta kendisidir.

Demek ki izdusum yapilacak “yon” kovaryans  $\Sigma$ 'nin en buyuk ozdegerine tekabul eden ozvektor olarak secilirse, temel bileşenlerden en onemlisini hemen bulmus olacagiz.

Cebirin geri kalanı  $w_2, w_3$  için devam eder, bu turetmenin detaylarini [1] ve [2] gibi kaynaklarda bulabilirsiniz. Fakat ulasilan sonuc en bileşenlerin 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 için o kolonun ortalama degerini tum kolondan cikartacagiz. PCA ile islem yaparken tum degerlerin sifir merkezli olmasi gerekiyor.

Daha sonra ozdegerlerini, vektorlerini hesaplayabilmek için verinin kovaryansini hesaplayacagiz.

```
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

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,

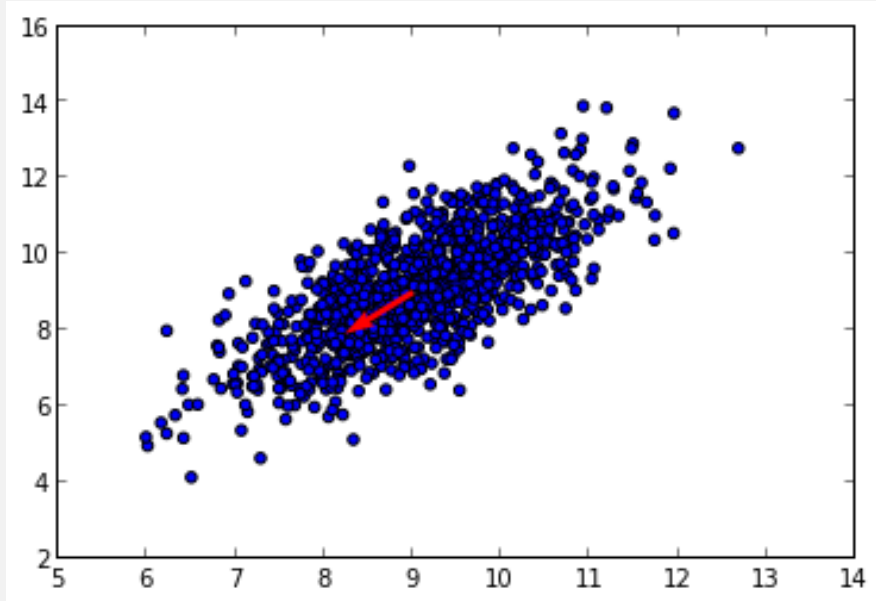
```
print eigs[1],eigv[:,1].T
print eigs[0],eigv[:,0].T

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

En büyük olan yonu quiver komutunu kullanarak orijinal veri seti üzerinde gosterelim,

```
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
```

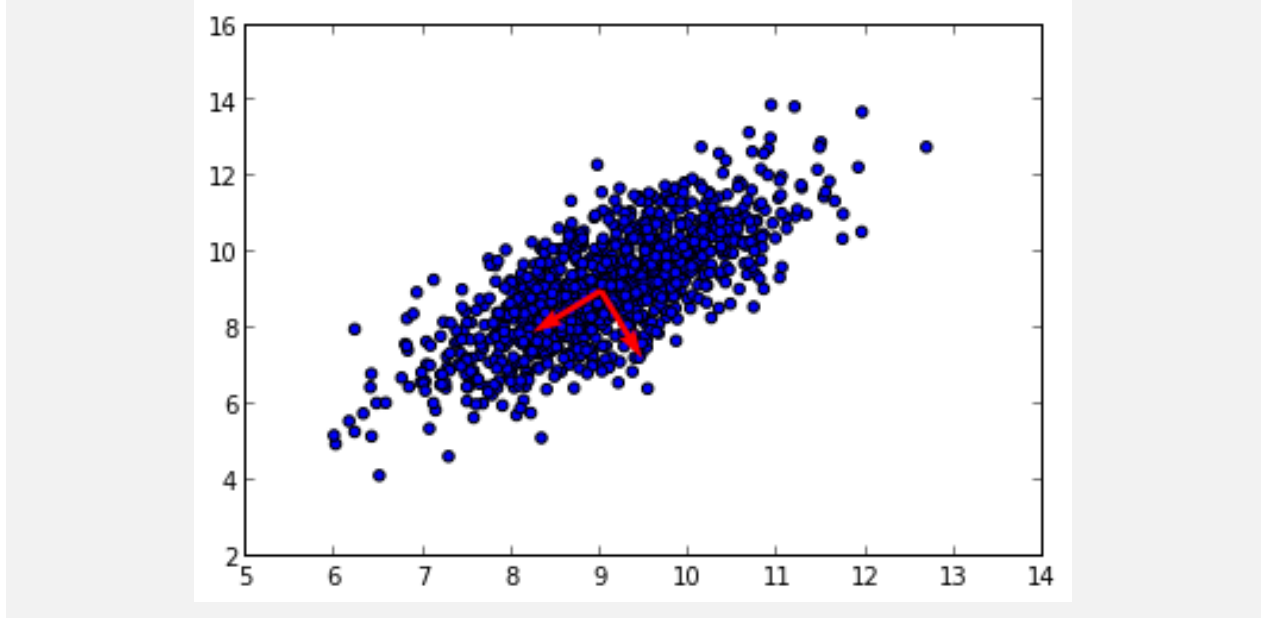
<matplotlib.quiver.Quiver at 0xbb6254c>



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,

```
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')
```

<matplotlib.quiver.Quiver at 0xc194c6c>



Bu ikinci yon birinciye dik olmalidi, 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>