ETH zürich

Principal Component Analysis (PCA)
(aka Hauptkomponentenanalyse)

Unsupervised Learning

- Supervised Learning: Erkläre Zielgrösse durch erklärende Variablen
  Ergebnis kann validiert werden (Fehlerrate, Kreuzvalidierung)
- Unsupervised Learning: Finde “interessante” Strukturen in Daten (z.B. Gruppen); es gibt keine Zielgrösse
  Ergebnis kann nicht validiert werden; subjektiv

Beispiel 1: Visualisieren

Wie visualisiert man hochdimensionale (>3) Datensätze ?

```
> head(USArrests)
           Murder Assault UrbanPop Rape
Alabama      13.2     236       58 21.2
Alaska       10.0     263       48 44.5
Arizona       8.1     294       80 31.0
Arkansas      8.8     190       50 19.5
California    9.0     276       91 40.6
Colorado      7.9     204       78 38.7
```

▪
▪
▪

Beispiel 2: Komprimieren

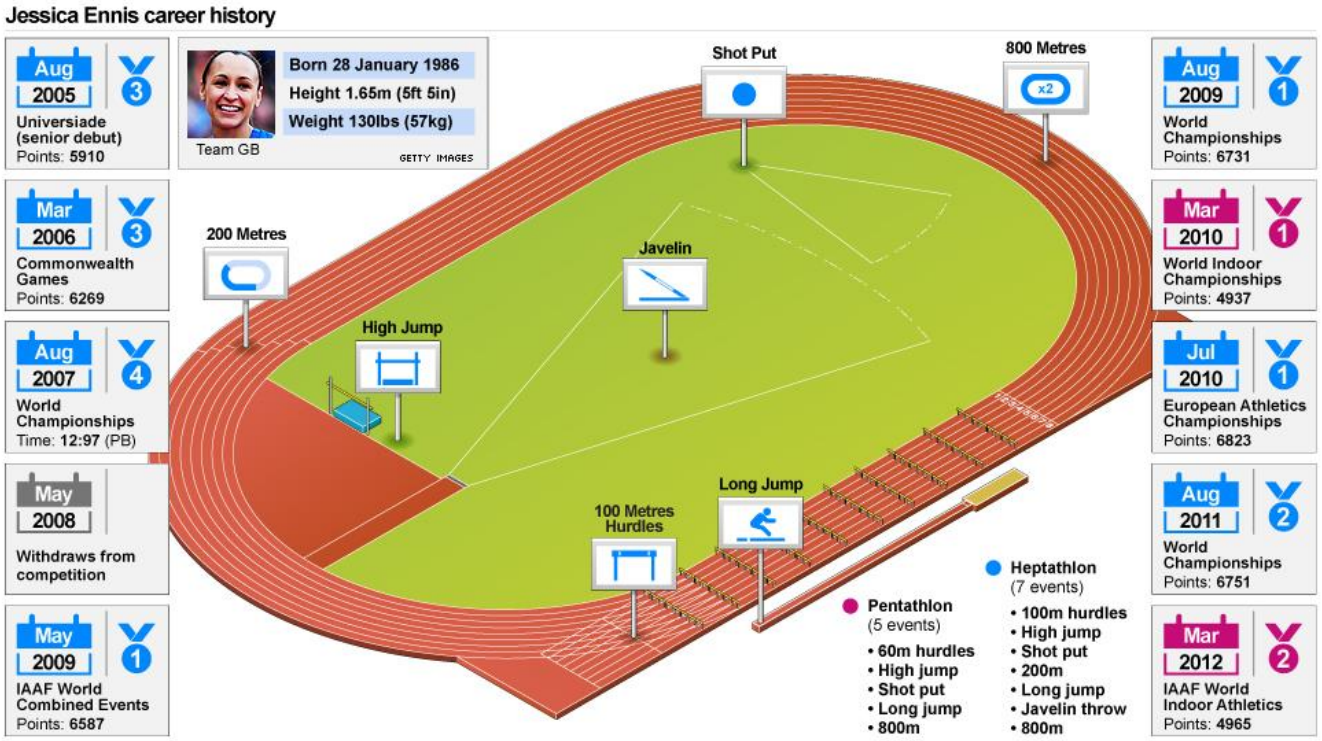
- Wie komprimiert man viele Variablen in wenige Variablen, die die Daten gut beschreiben?

	Gen 1	Gen 2	…	Gen 6829	Gen 6830
Person 1	1.3	4.3		3.1	9.2
Person 2	8.2	5.5		3.2	5.8
…					

	Z1	Z2	…	Z9	Z10
Person 1	1.3	4.3		3.1	9.2
Person 2	8.2	5.5		3.2	5.8
…					

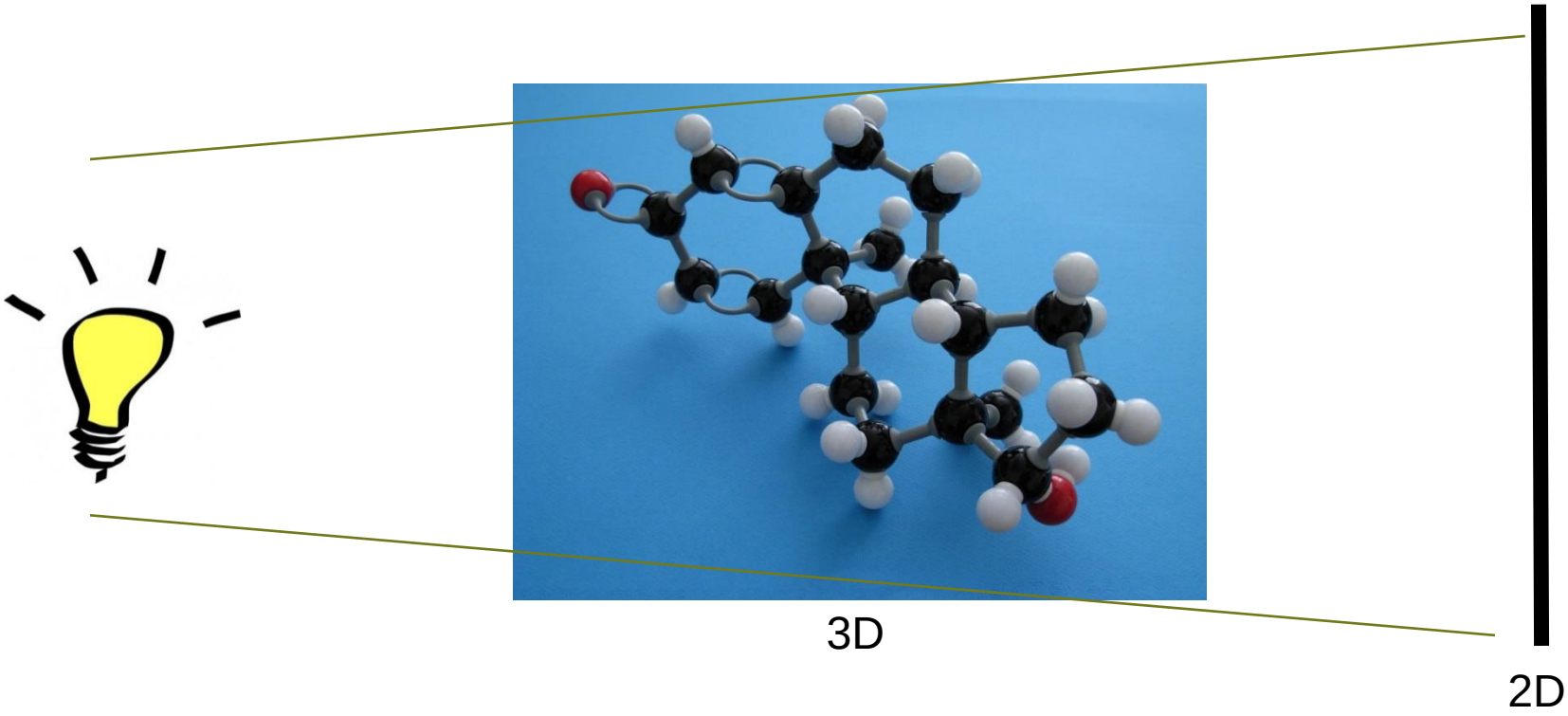
Beispiel 3: Unterscheiden

Wie erstellt man einen eindimensionalen Index, der Subjekte möglichst gut unterscheidet?



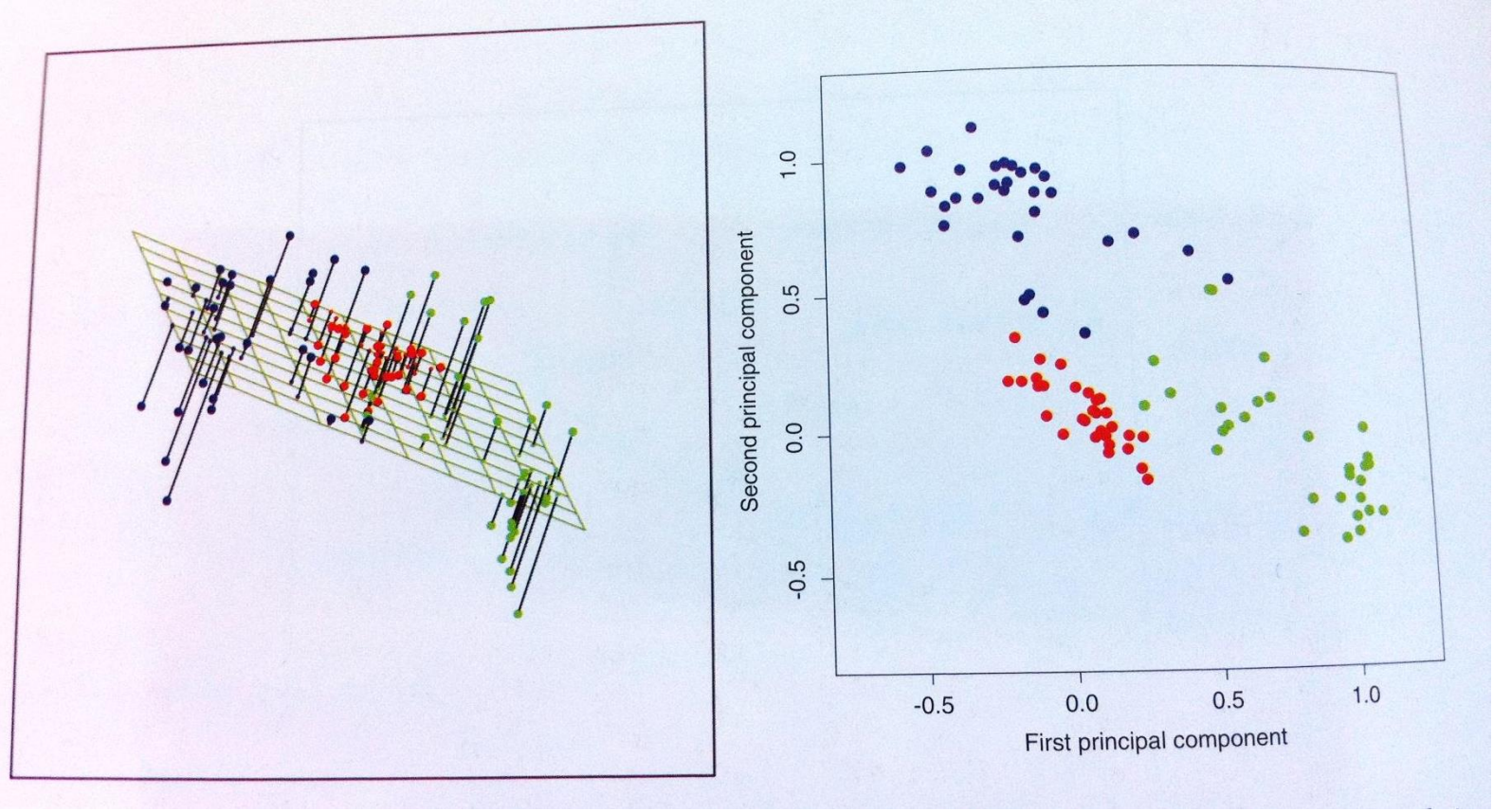
Siebenkampf

PCA: “Gute” Projektion in wenige Dimensionen



“Gut” = Möglichst viel Varianz

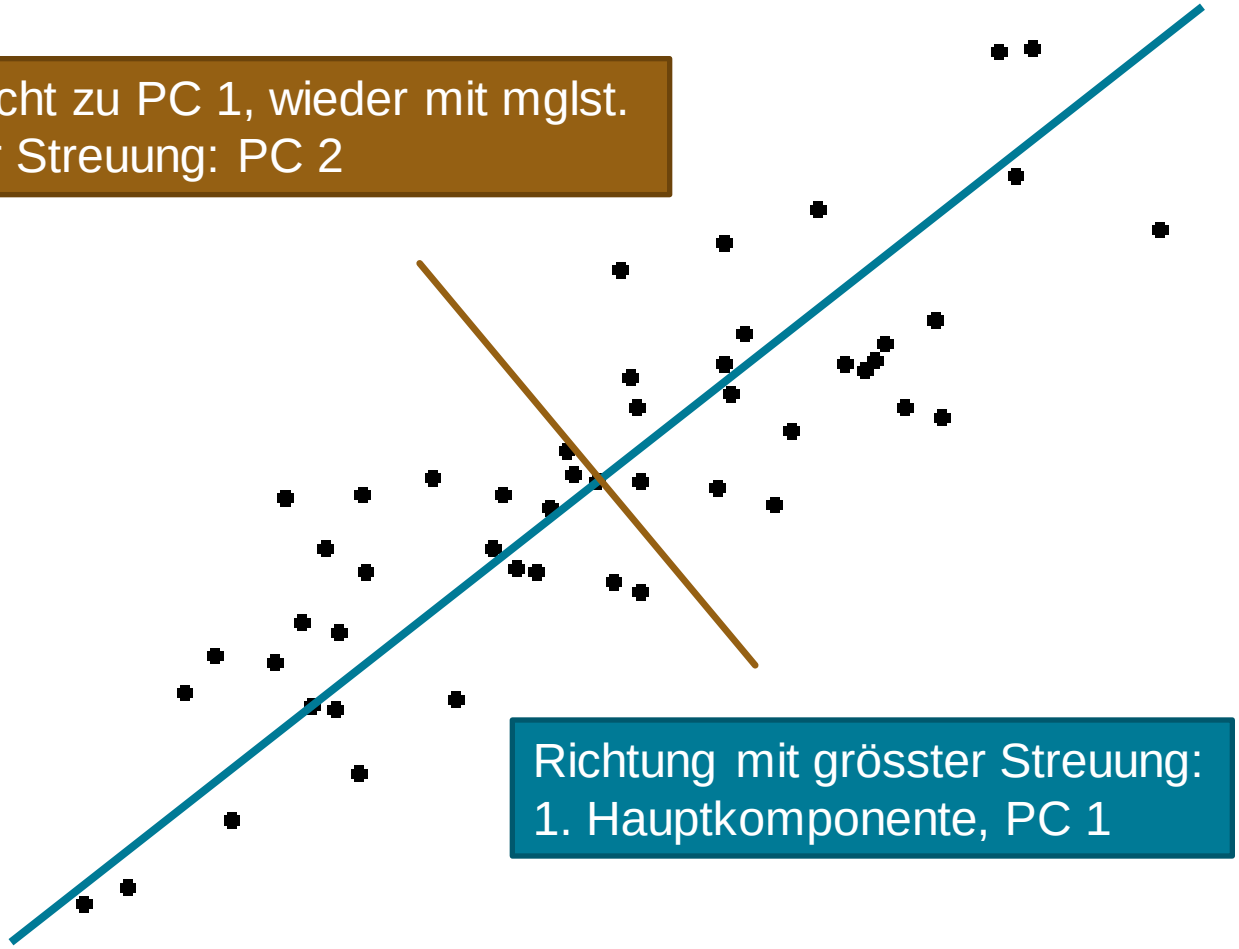
PCA: “Bester” Subraum (bzgl. Residuenquadratsumme)



Aus Buch ISLR

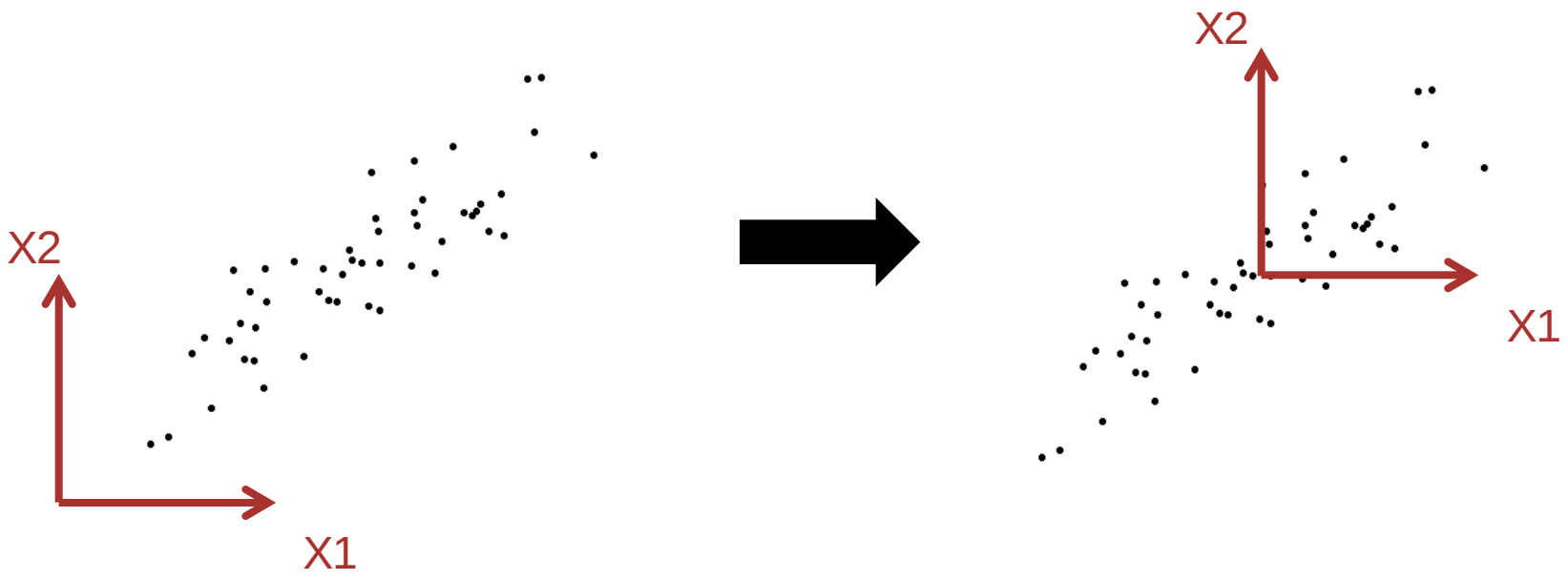
PCA: Intuition

Senkrecht zu PC 1, wieder mit mglst. grosser Streuung: PC 2

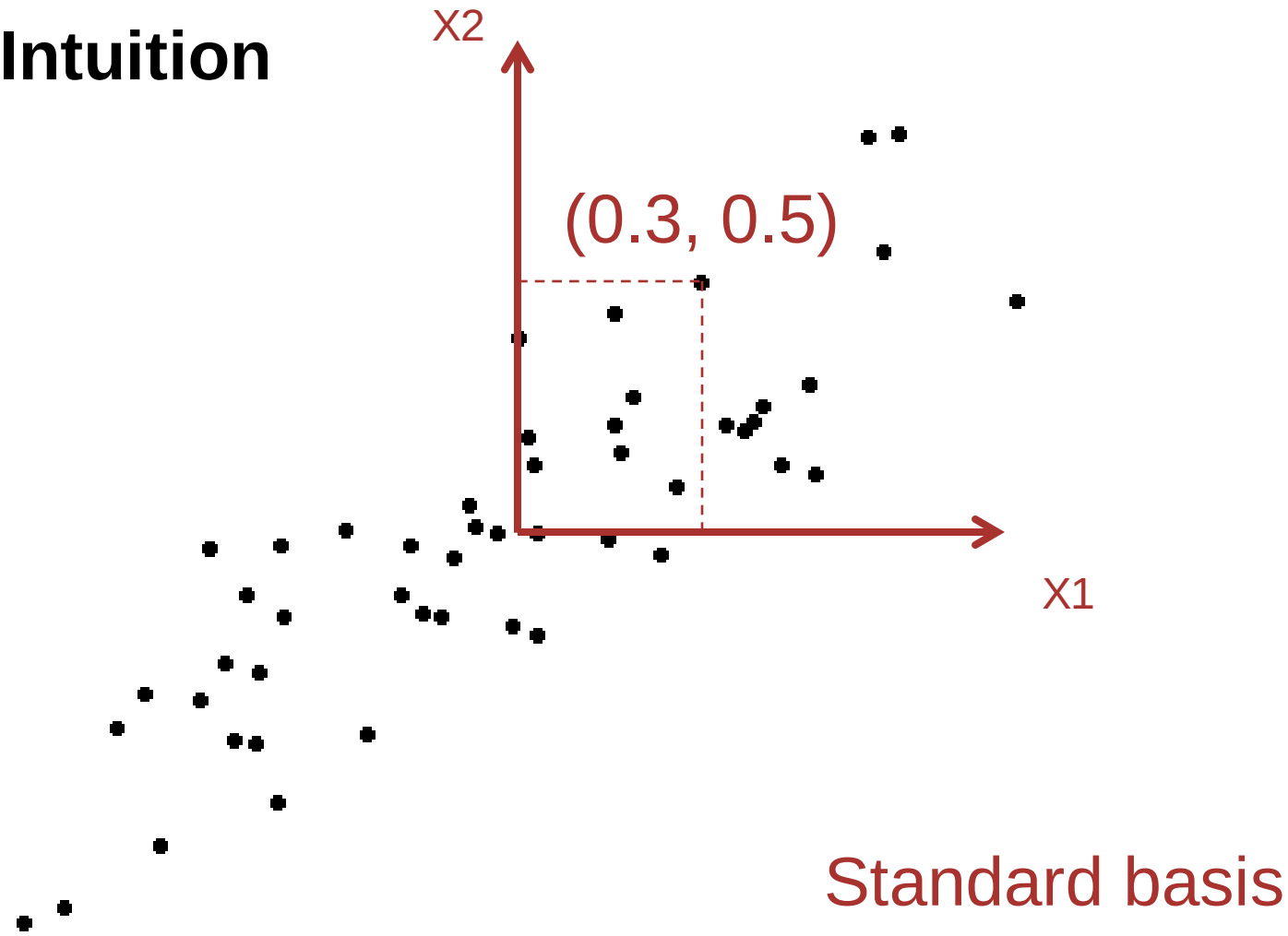


Richtung mit grösster Streuung: 1. Hauptkomponente, PC 1

Konvention: Zentrieren

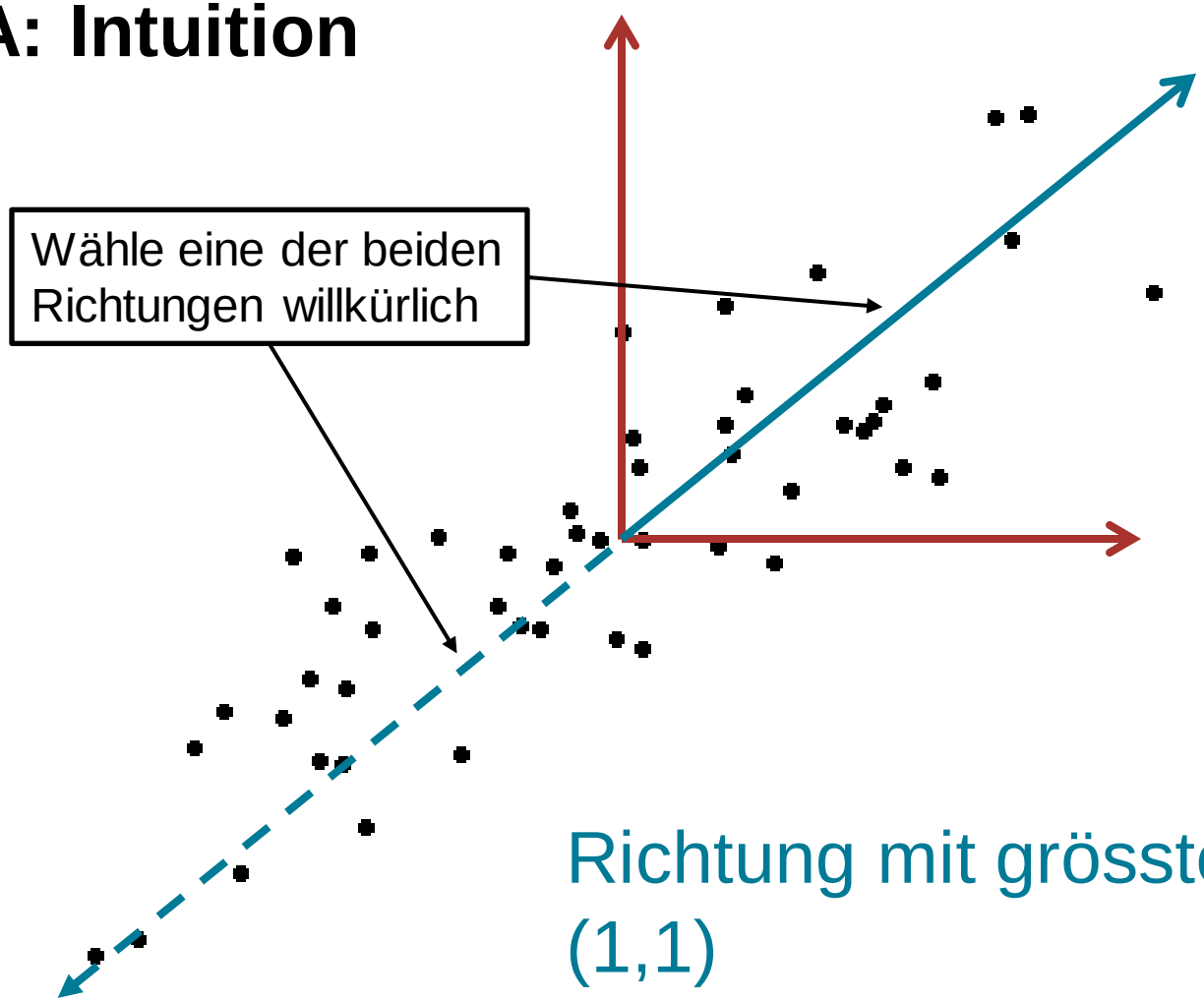


PCA: Intuition



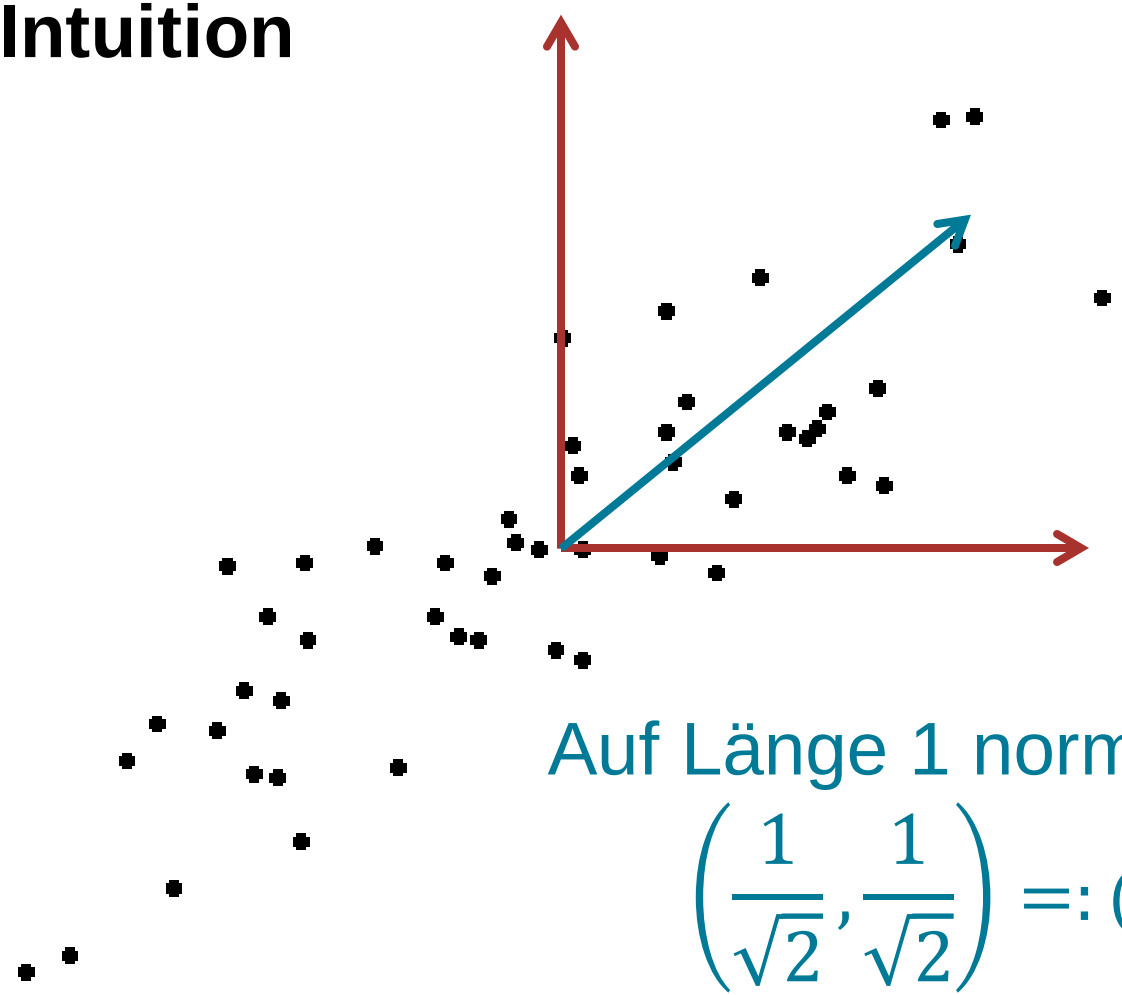
Standard basis

PCA: Intuition



Richtung mit grösster Streuung: (1,1)

PCA: Intuition

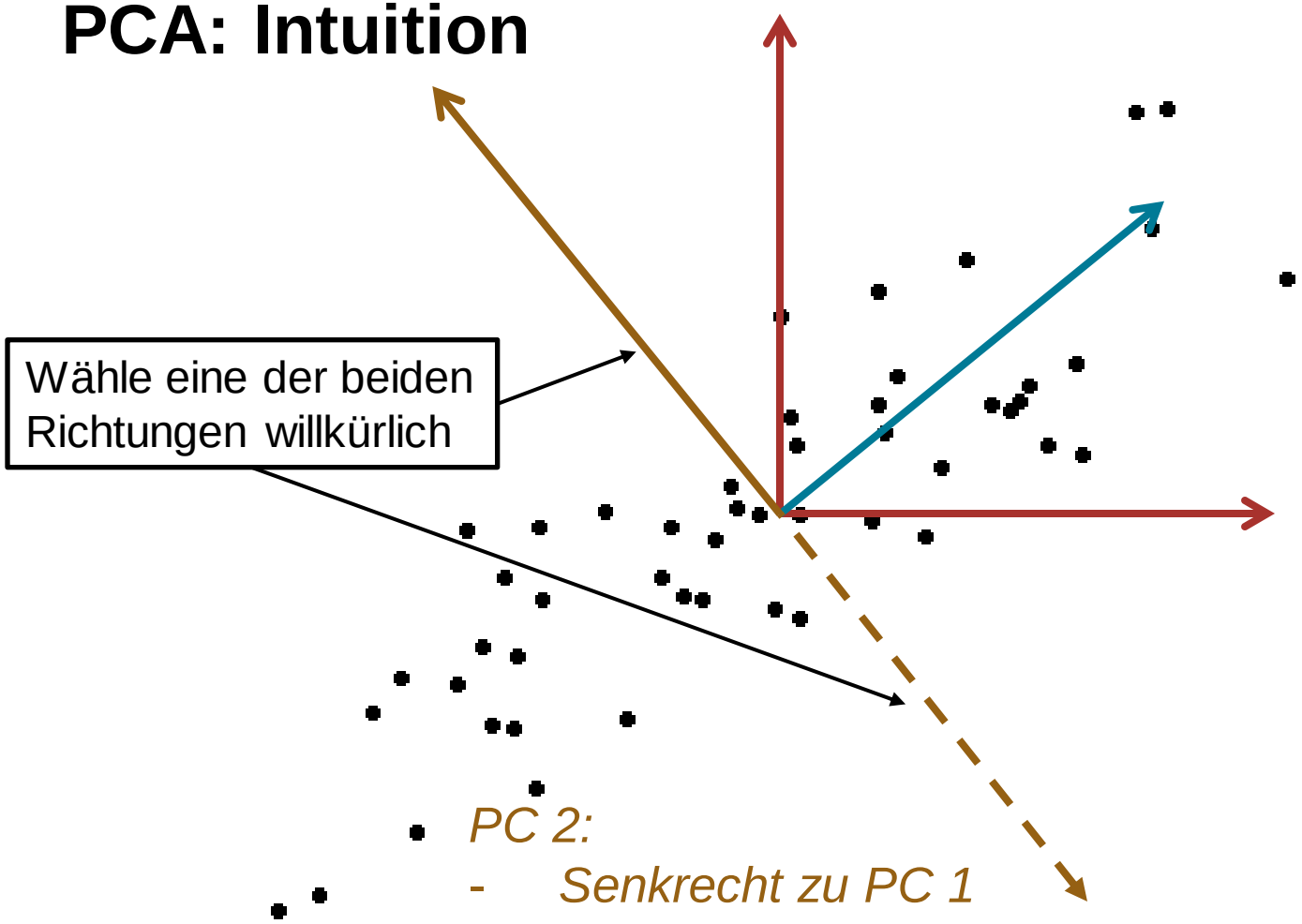


Auf Länge 1 normieren:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) =: (\phi_{11}, \phi_{21})$$

1. Principal Component (PC 1)

PCA: Intuition

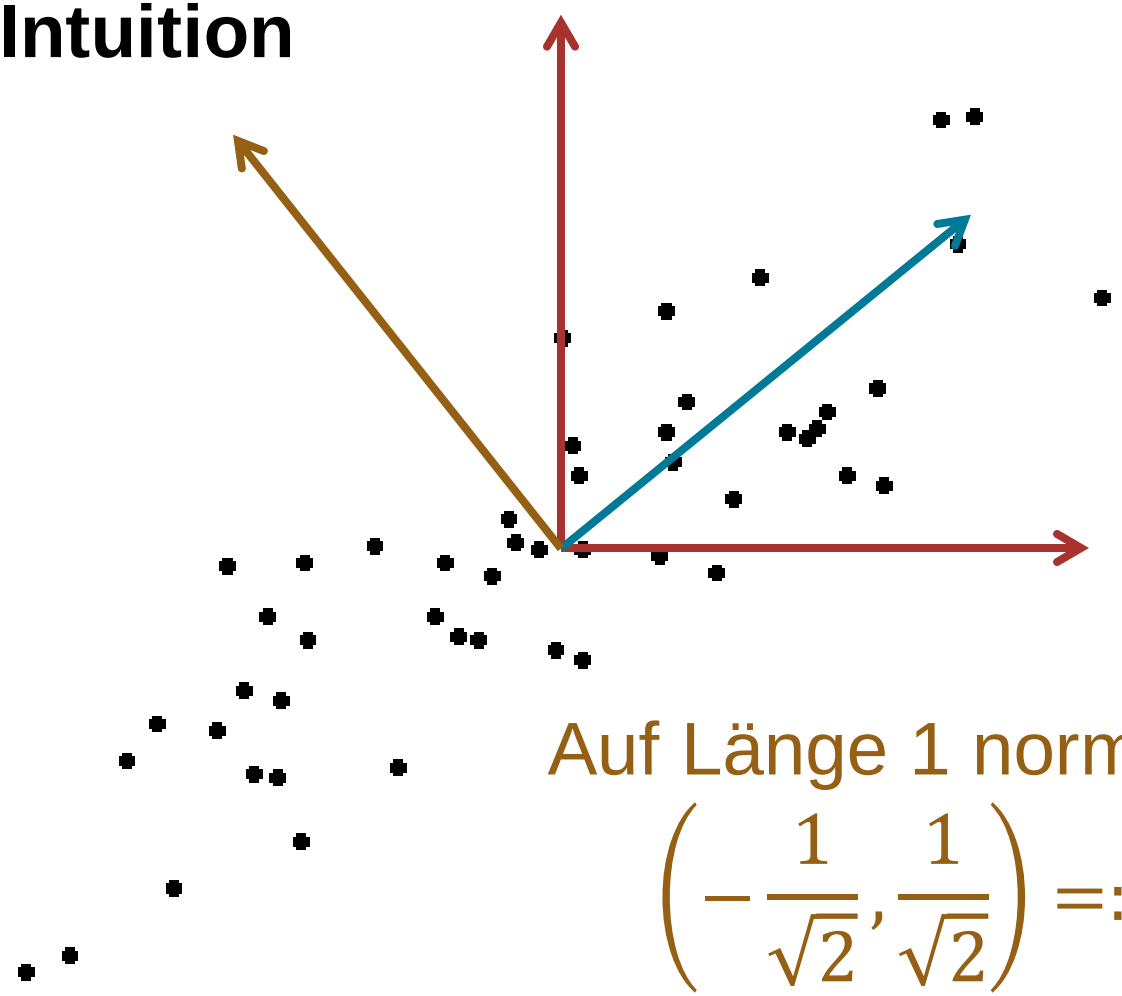


PC 2:

- *Senkrecht zu PC 1*
- *Wieder Richtung mit grösster Streuung*

In 2d gibt es nur noch zwei Möglichkeit; wähle eine willkürlich: (-1, 1)

PCA: Intuition

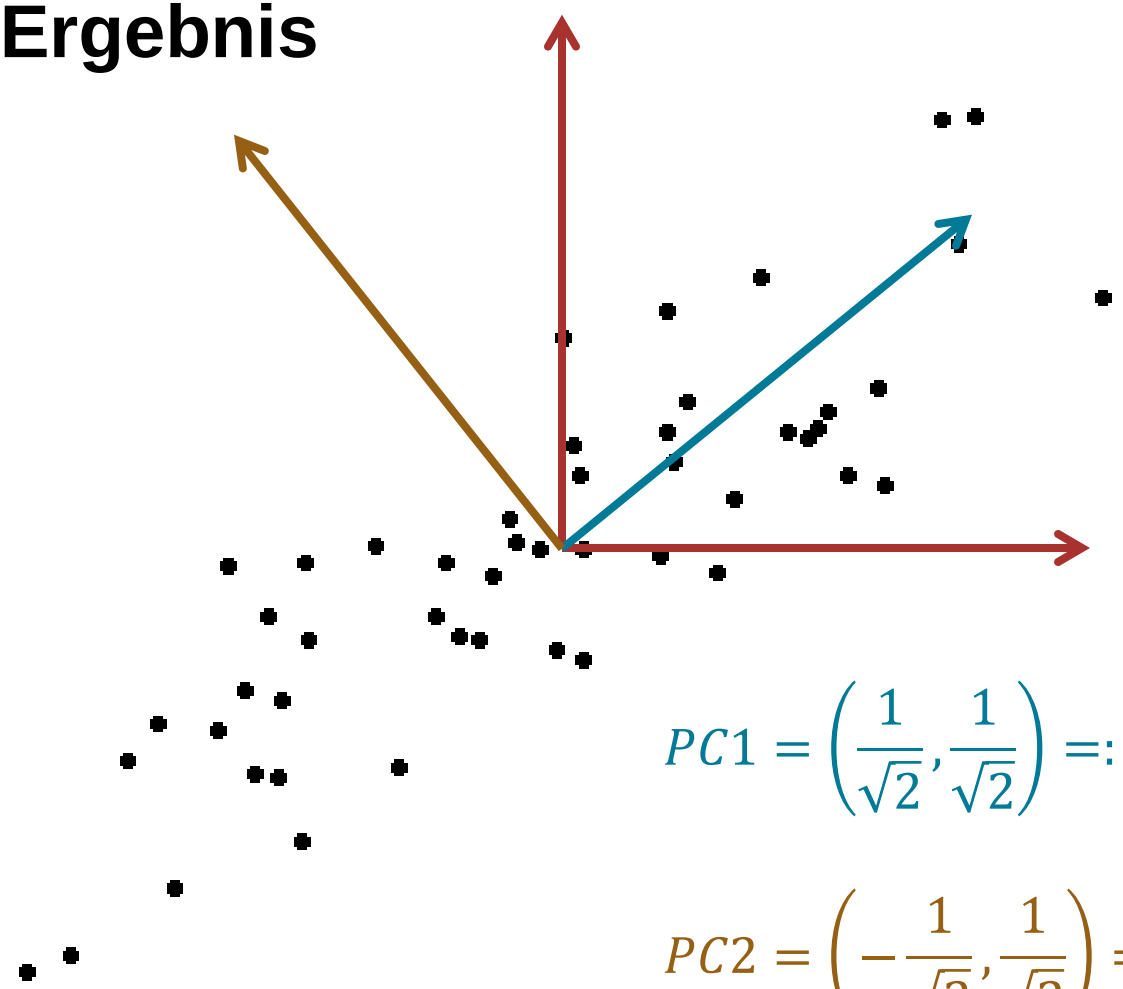


Auf Länge 1 normieren:

$$\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) =: (\phi_{12}, \phi_{22})$$

2. Principal Component (PC 2)

PCA: Ergebnis

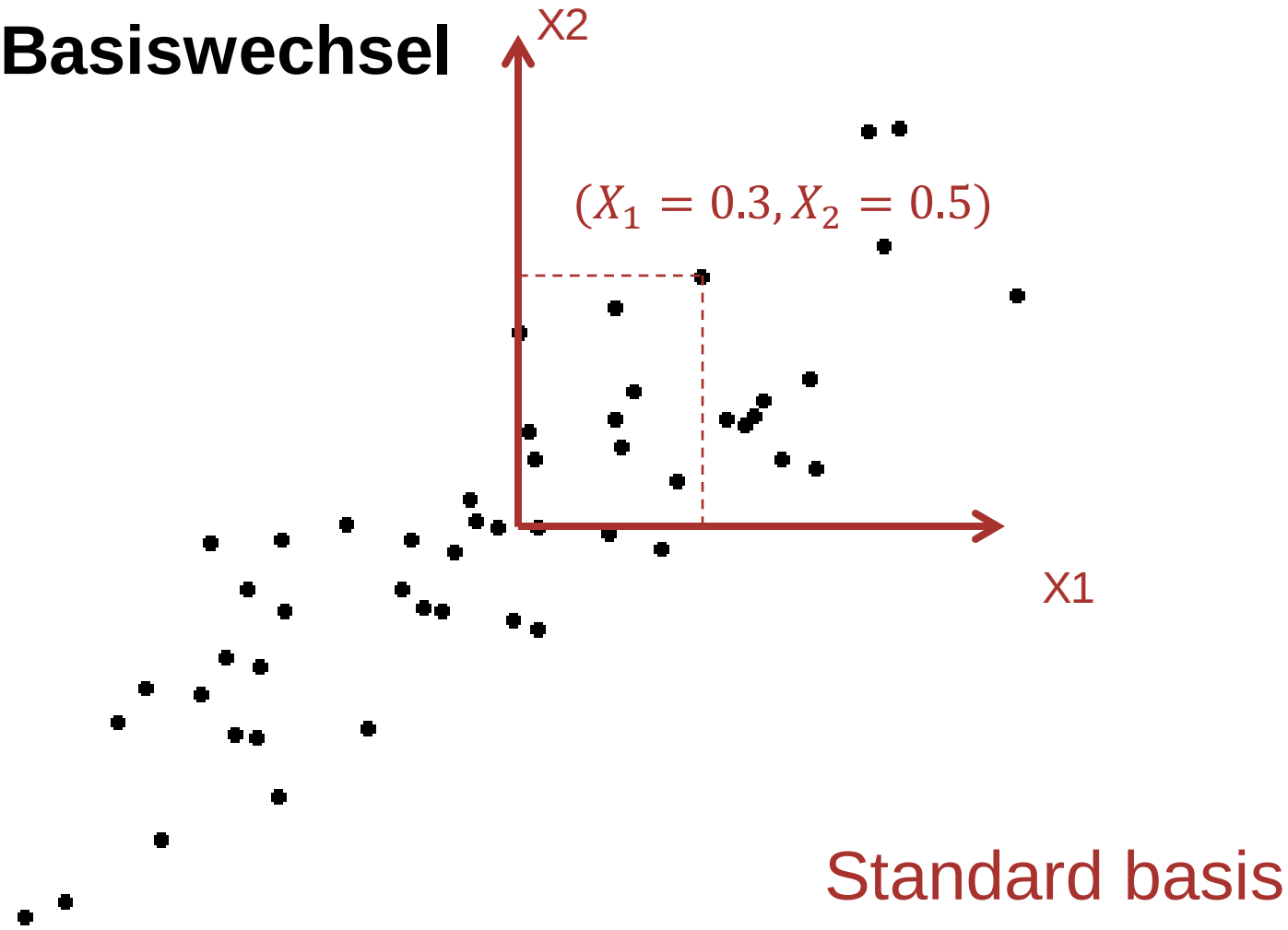


Richtung der PCs bzgl. Standardbasis: **“loadings”**

$$PC1 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) =: (\phi_{11}, \phi_{21})$$

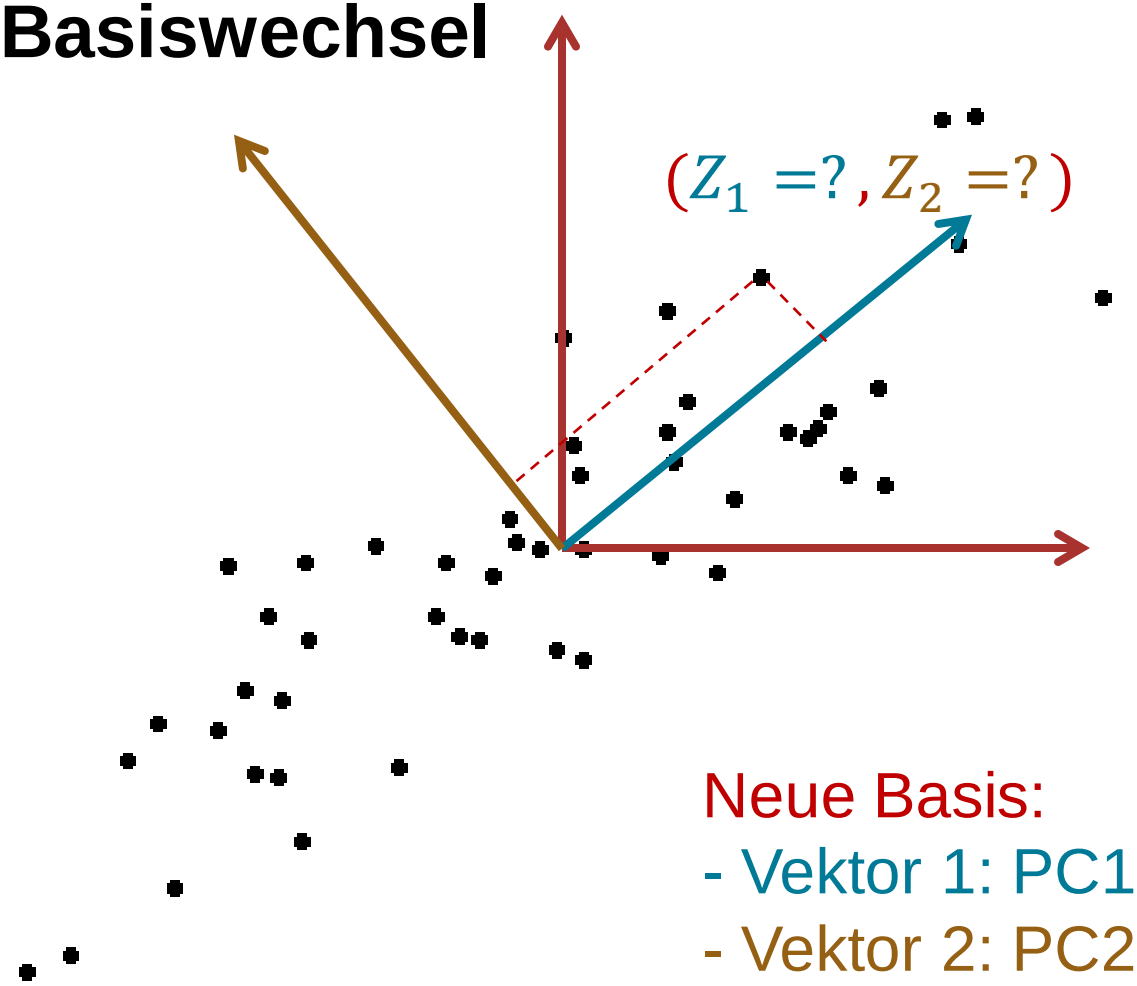
$$PC2 = \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) =: (\phi_{12}, \phi_{22})$$

PCA: Basiswechsel



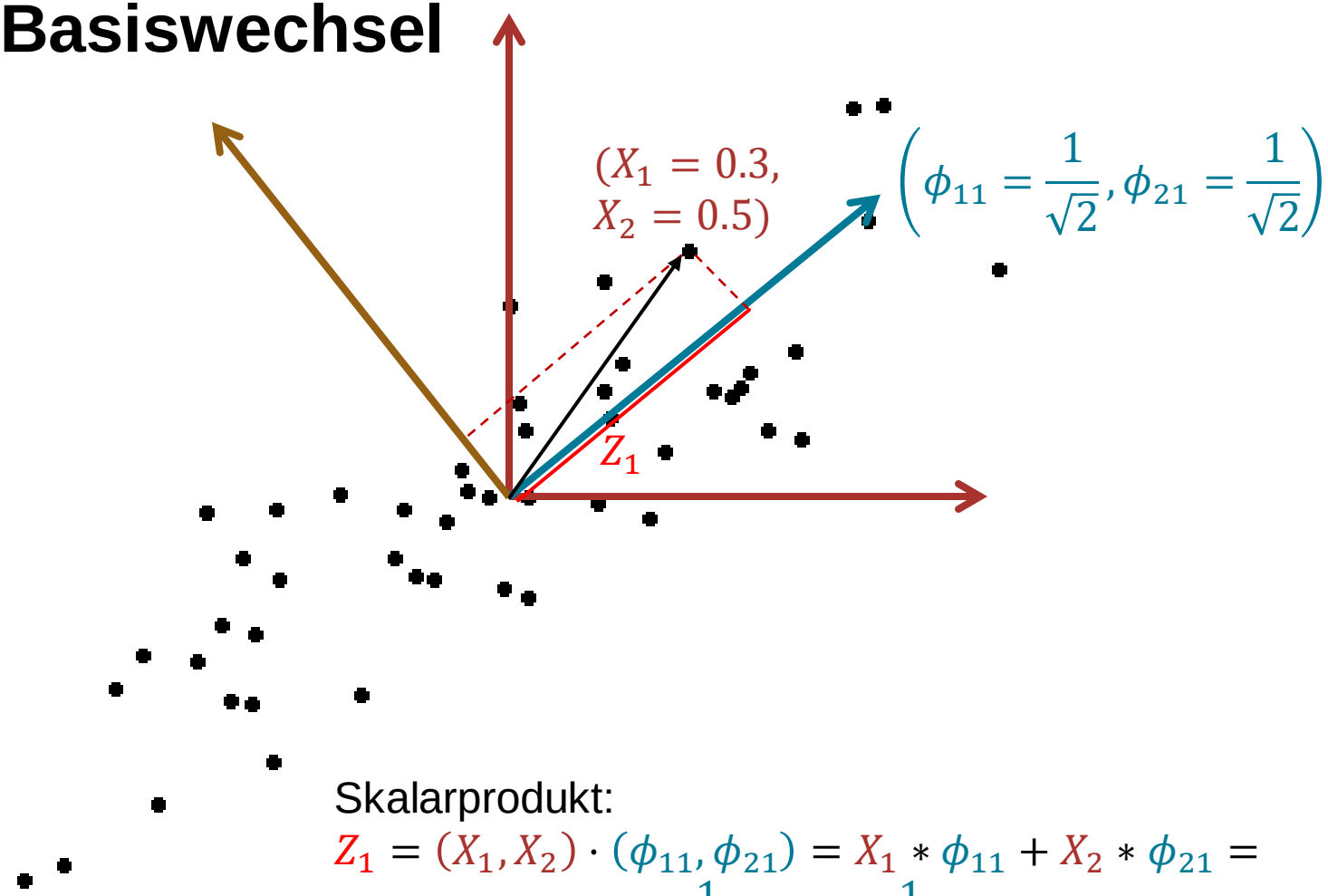
Standard basis

PCA: Basiswechsel



Neue Basis:
- Vektor 1: PC1
- Vektor 2: PC2

PCA: Basiswechsel



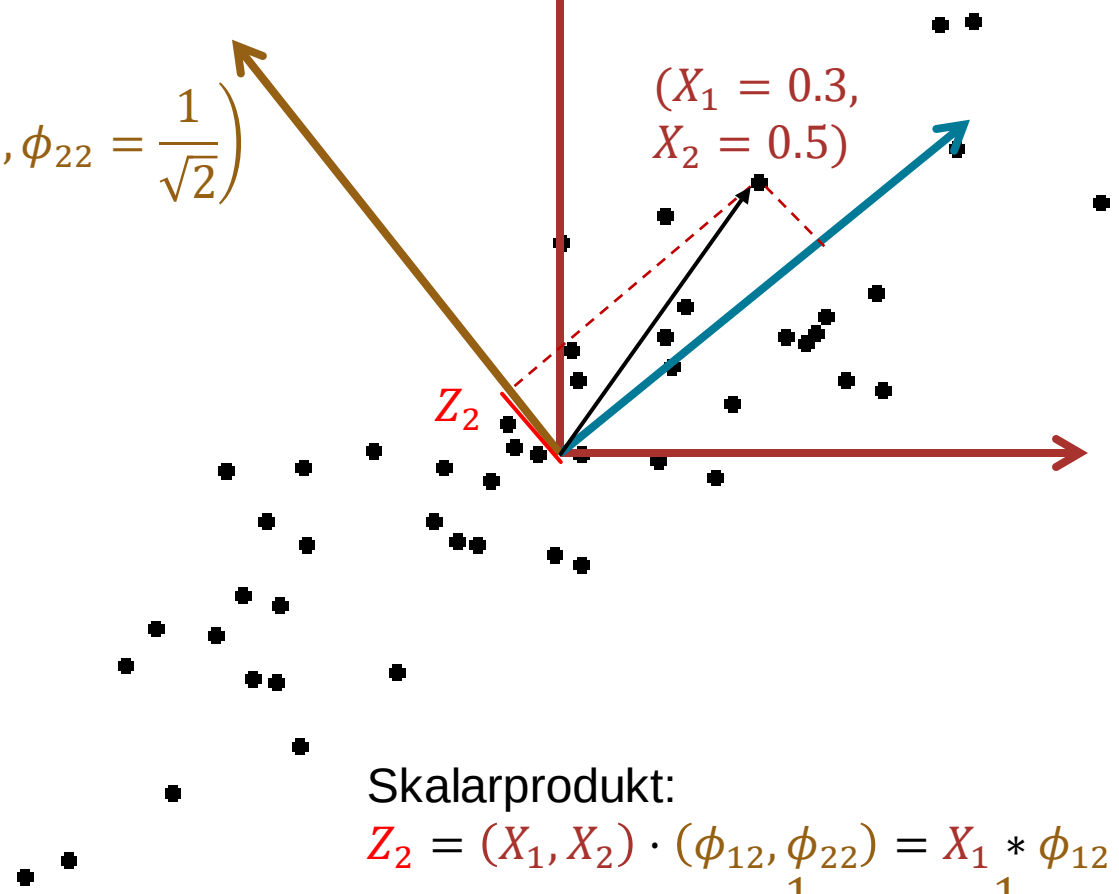
Skalarprodukt:

$$Z_1 = (X_1, X_2) \cdot (\phi_{11}, \phi_{21}) = X_1 * \phi_{11} + X_2 * \phi_{21} =$$

$$= 0.3 * \frac{1}{\sqrt{2}} + 0.5 * \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.57$$

PCA: Basiswechsel

$$\left(\phi_{12} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \phi_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$



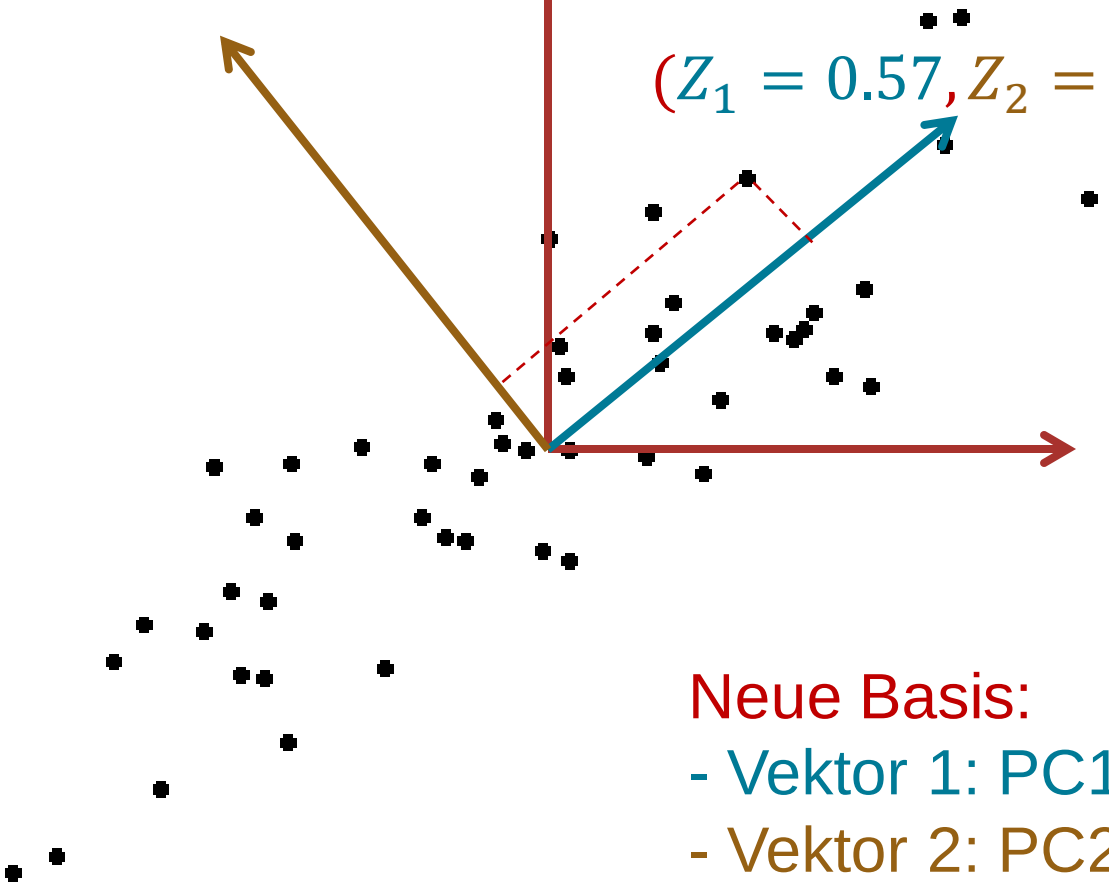
Skalarprodukt:

$$Z_2 = (X_1, X_2) \cdot (\phi_{12}, \phi_{22}) = X_1 * \phi_{12} + X_2 * \phi_{22} =$$
$$= 0.3 * \frac{-1}{\sqrt{2}} + 0.5 * \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0.14$$

	Koord. 1	Koord. 2
Std. Basis	$X_1 = 0.3$	$X_2 = 0.5$
PC Basis	$Z_1 = 0.57$	$Z_2 = 0.14$

"scores"

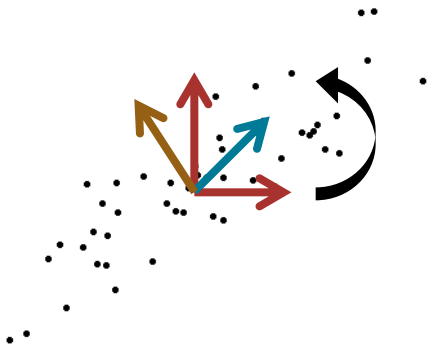
PCA: Basiswechsel



Neue Basis:
- Vektor 1: PC1
- Vektor 2: PC2

PCA: Basiswechsel mit Linearer Algebra

	Koord. 1	Koord. 2
Std. Basis	$X_1 = 0.3$	$X_2 = 0.5$
PC Basis	$Z_1 = 0.57$	$Z_2 = 0.14$



- Standard Basis und PC Basis sind je eine Orthonormal Basis (Achsen senkrecht, Länge 1)
- Basiswechsel: Rotationsmatrix Φ
- Spalten der **Rotationsmatrix** sind *loadings*:

$$\Phi = \begin{matrix} \text{PC1} & \text{PC2} \\ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} & \begin{matrix} \text{X1} \\ \text{X2} \end{matrix} \end{matrix}$$

- Basiswechsel mit Rotationsmatrix ist einfach:
  Φ: Von PC Basis nach Standardbasis
  Φ^{-1}: Von Standardbasis nach PC Basis

Bzgl. Std.basis

$$\Phi^{-1} = \begin{matrix} \text{X1} & \text{X2} \\ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} & \begin{matrix} \text{PC1} \\ \text{PC2} \end{matrix} \end{matrix} \quad ; Z = \Phi^{-1} * X = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.57 \\ 0.14 \end{pmatrix}$$

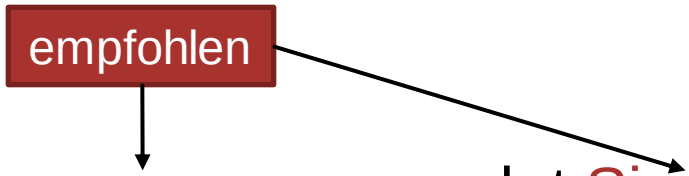
Bzgl. PC Basis "scores"

Wie findet man 1.PC - Mathematik

- Zentriere Daten
- Angenommen, 1. PC ist in Richtung
$$\Phi_1 = (\phi_{11}, \phi_{21}, \dots, \phi_{p1})$$
- Betrachte Datenpunkt i:
Koordinaten bzgl. Standardbasis $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$
- Neue erste Koordinate von Datenpunkt x_i:
$$z_{i1} = \Phi_1 * x_i = \phi_{11} * x_{i1} + \phi_{21} * x_{i2} + \cdots + \phi_{p1} * x_{ip}$$
- Koordinaten bzgl. PC-Basis $z_i = (z_{i1}, z_{i2}, \dots, z_{ip})$
- Kriterium für 1. PC (vgl. Gleichung (10.3) in ISLR):
$$\max_{\phi_{11},\dots,\phi_{p1}} \left(\widehat{Var}(z_{i1})\right) \quad sodass\ Länge\ von\ \Phi_1 = 1$$

Wie findet man 1. PC - Numerik

- Singulärwertzerlegung der Kovarianzmatrix (= Singular Value Decomposition, SVD)
- Schlechtere Alternative: Eigenwertzerlegung der Kovarianzmatrix

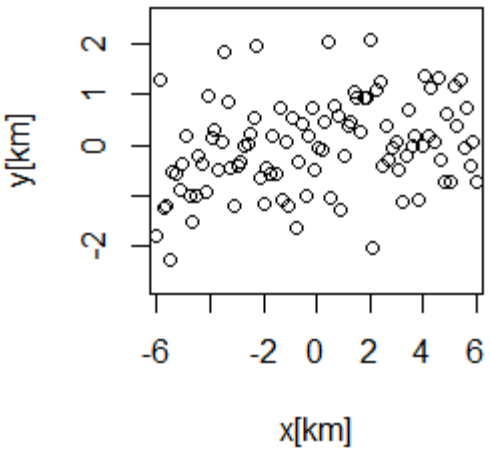


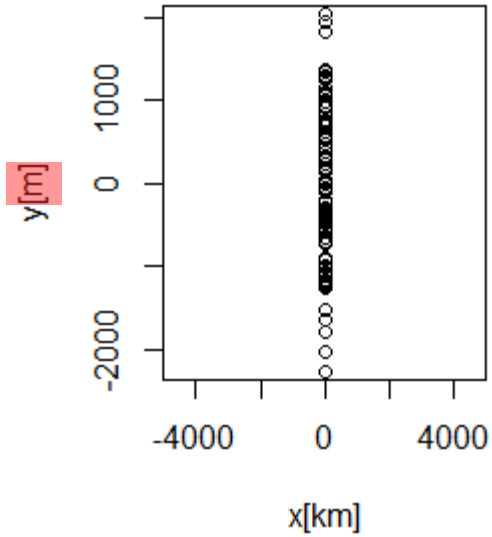
In R:

- Funktion *prcomp* verwendet Singulärwertzerlegung der Kovarianzmatrix
- Funktion *princomp* verwendet Eigenwertzerlegung der Kovarianzmatrix

To scale or not to scale …

Messungen auf einer Landkarte (z.B. Bodenschätze)





Welche Einheiten ?

To scale or not to scale …

Faustregeln:

- Daten immer zentrieren
- Falls alle Variablen in der gleichen Einheit sind: Nicht skalieren
- Falls Variablen in unterschiedlichen Einheiten sind: Skalieren

Beispiel 1: Visualisierung

```
> head(USArrests)
           Murder Assault UrbanPop Rape
Alabama      13.2     236       58 21.2
Alaska       10.0     263       48 44.5
Arizona       8.1     294       80 31.0
Arkansas      8.8     190       50 19.5
California    9.0     276       91 40.6
Colorado      7.9     204       78 38.7
```

▪
▪
▪

Beispiel 1: Interpretation der PCs

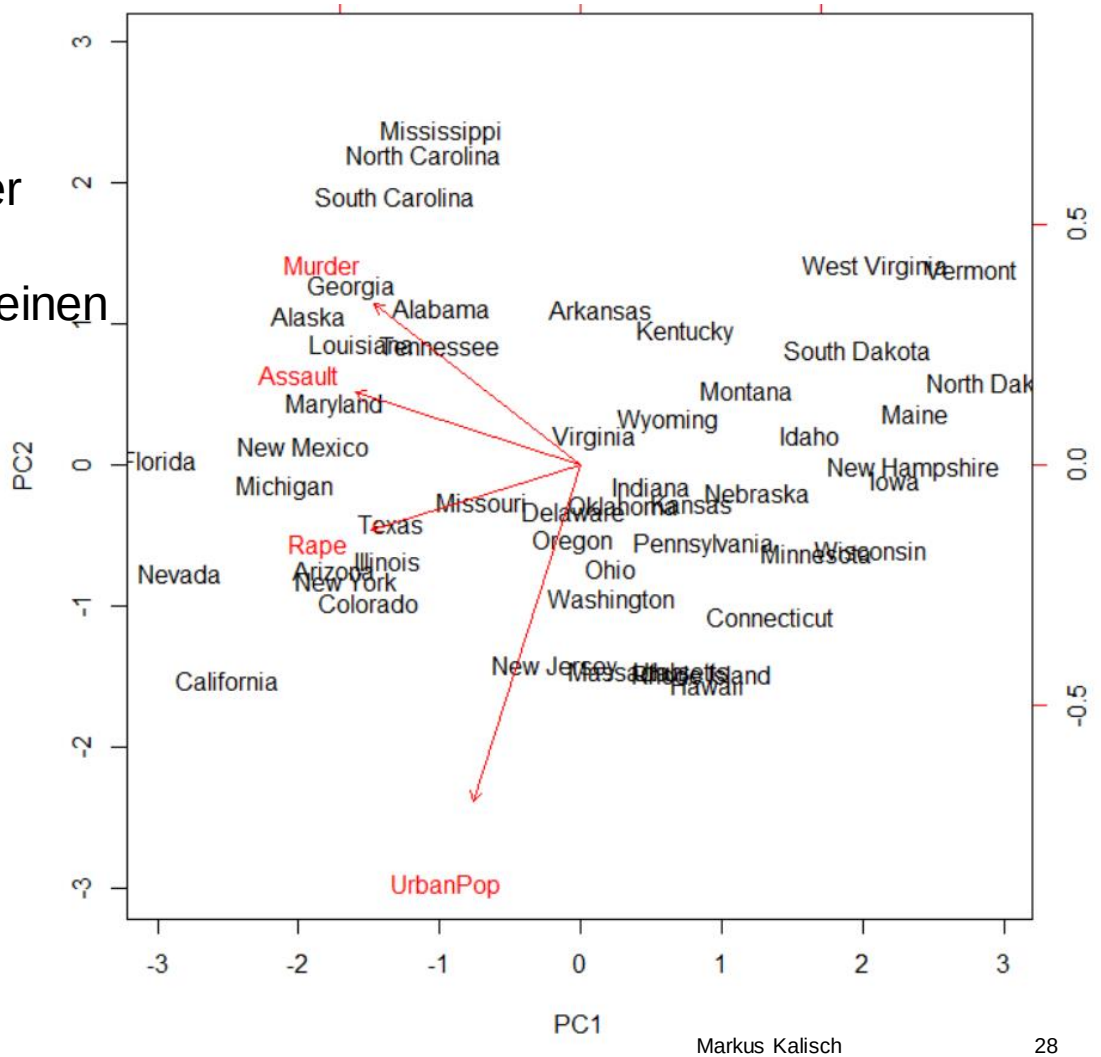
```
> pr.out$rotation
                PC1        PC2
Murder   -0.5358995  0.4181809
Assault  -0.5831836  0.1879856
UrbanPop -0.2781909 -0.8728062
Rape     -0.5434321 -0.1673186
```

- PC 1 ist gross, wenn v.a. Murder, Assault und Rape klein sind
  → PC 1 spiegelt “Verbrechen” wieder
- PC 2 ist gross, wenn UrbanPop klein ist
  → PC 2 spiegelt “Verstädterung” wieder

Biplot: PC1 vs PC2

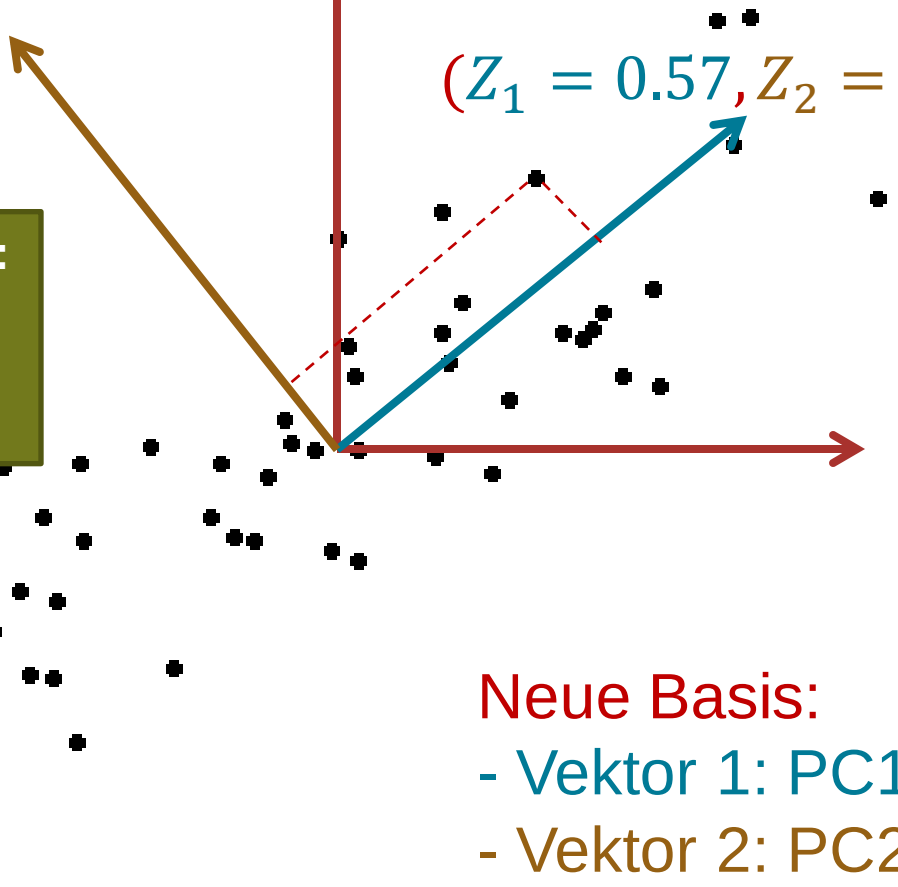
- Projektion auf die Ebene mit der grössten Streuung
- West Virginia und Vermont scheinen ähnlich; California und Vermont scheinen verschieden
- Rot: Projektion der ursprüngl. Koordinatenachsen:

PC1 ~ Verbrechen
PC2 ~ Verstädterung



PCA: Dim.reduktion

	Koord. 1	Koord. 2
Std. Basis	$X_1 = 0.3$	$X_2 = 0.5$
PC Basis	$Z_1 = 0.57$	$Z_2 = 0.14$
Dim.reduktion	$Z_1 = 0.57$	-

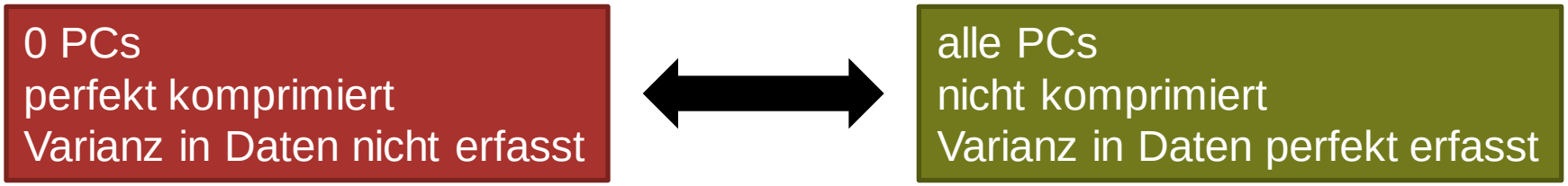


Dimensionsreduktion:
Behalte nur die ersten paar PC's
→ viel Varianz erklärt

Neue Basis:
- Vektor 1: PC1
- Vektor 2: PC2

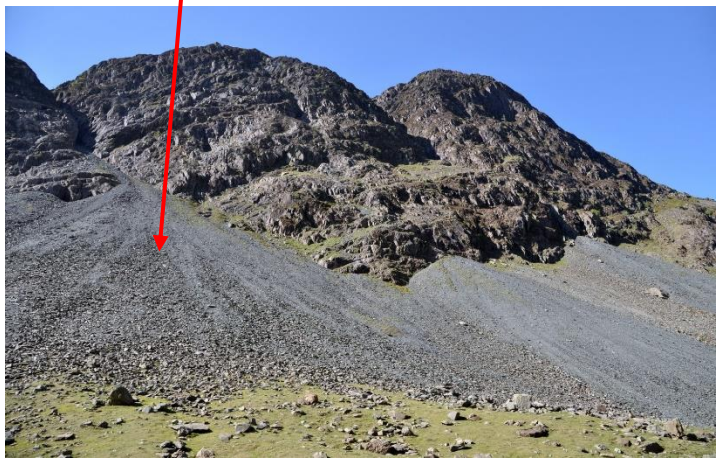
Wie viele PCs?

- Maximale Anzahl PCs:
  min(Anzahl X-Variablen, Anzahl Samples-1)

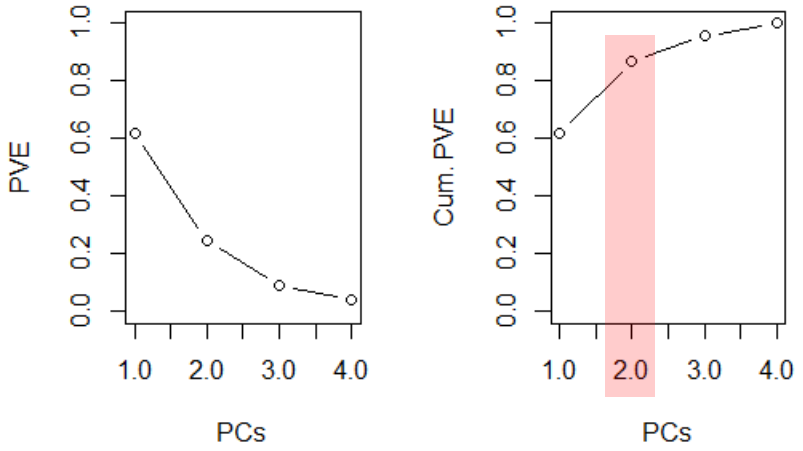


Kompromiss

Screeplot: Wie viele PCs bei USArrests?



- Ziel: Möglichst viel Varianz in den Daten erfassen
- Varianz entlang der PCs nimmt ab



Faustregel: 80% der Varianz erklären
→ 2 PCs in diesem Bsp

Beispiel 2: NCI60 Data

	Gen 1	Gen 2	…	Gen 6829	Gen 6830
Person 1	0.3	1.18	…	-0.34	-1.93
…					
Person 64	0.35	-0.27	…	-0.15	1.21

- 64 Krebszell-Linien; je 6830 Gene
- Wie fasst man die Anzahl Gene zusammen ?
- (Vgl. ISLR 10.6.1)

Beispiel 2: NCI60 Data

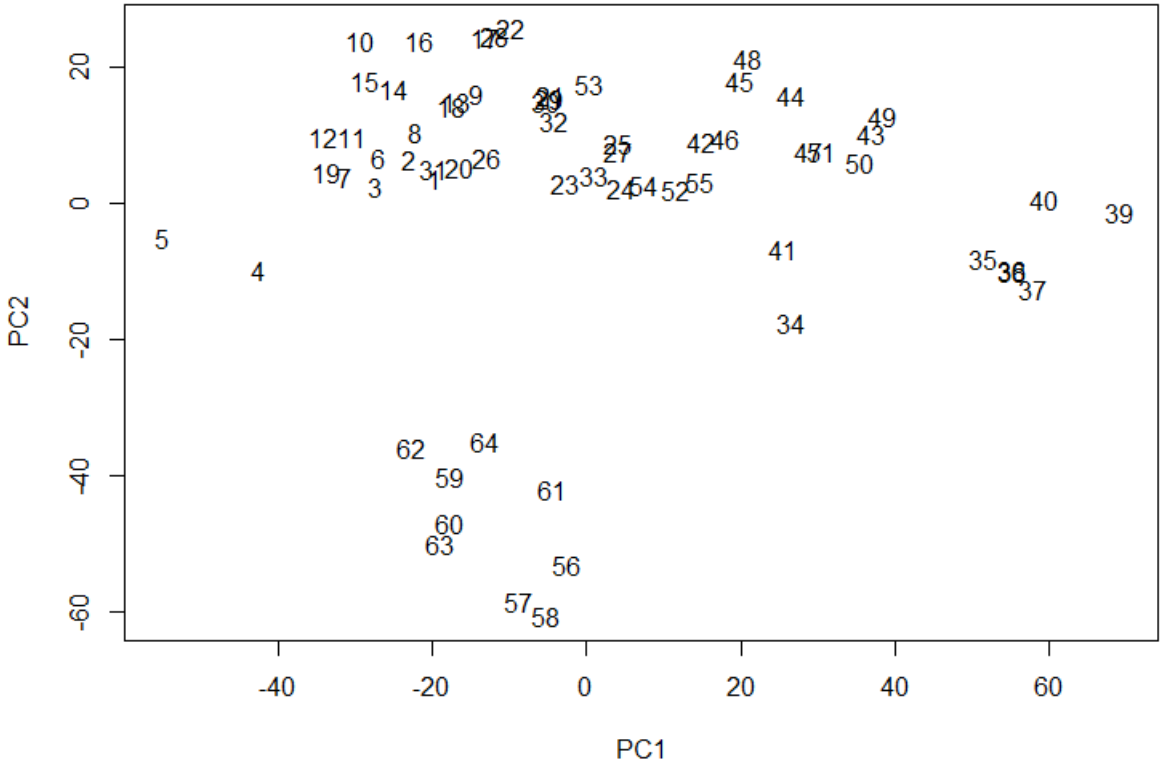
	Gen 1	Gen 2	…	Gen 6829	Gen 6830
Person 1	0.3	1.18	…	-0.34	-1.93
…					
Person 64	0.35	-0.27	…	-0.15	1.21

PCA

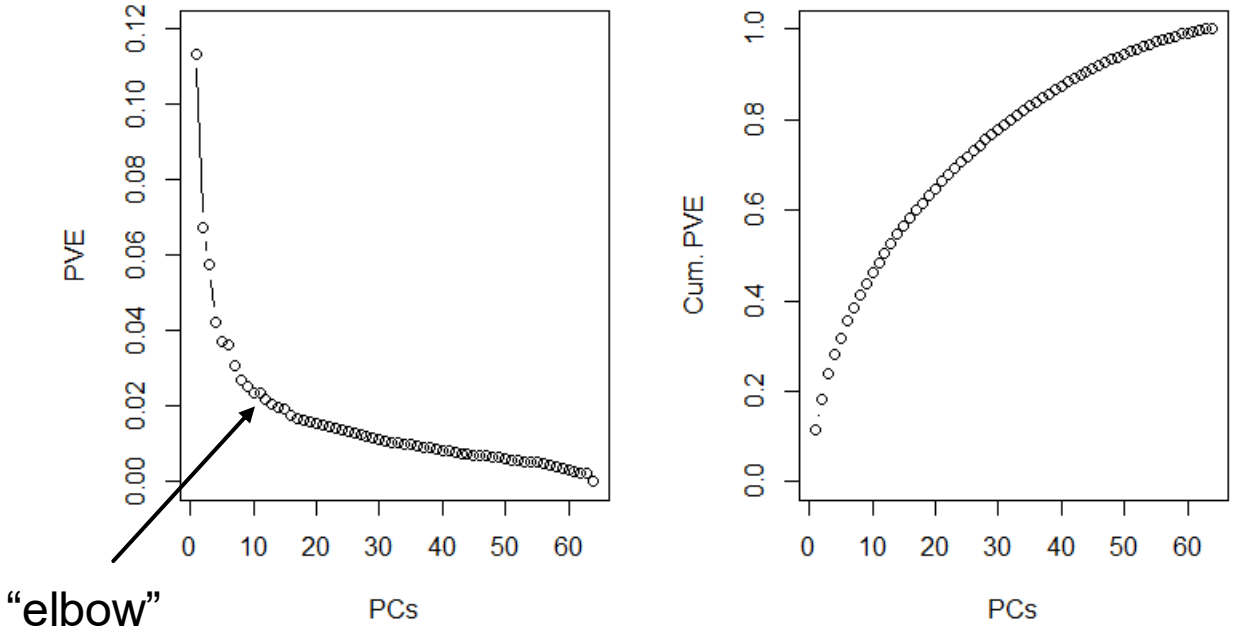
	Z1	Z2	…	Z9	Z10
Person 1	1.3	4.3		3.1	9.2
…					
Person 64	8.2	5.5		3.2	5.8

Wie viele PCs?

Beispiel 2: Klare Struktur mit nur 2 PCs



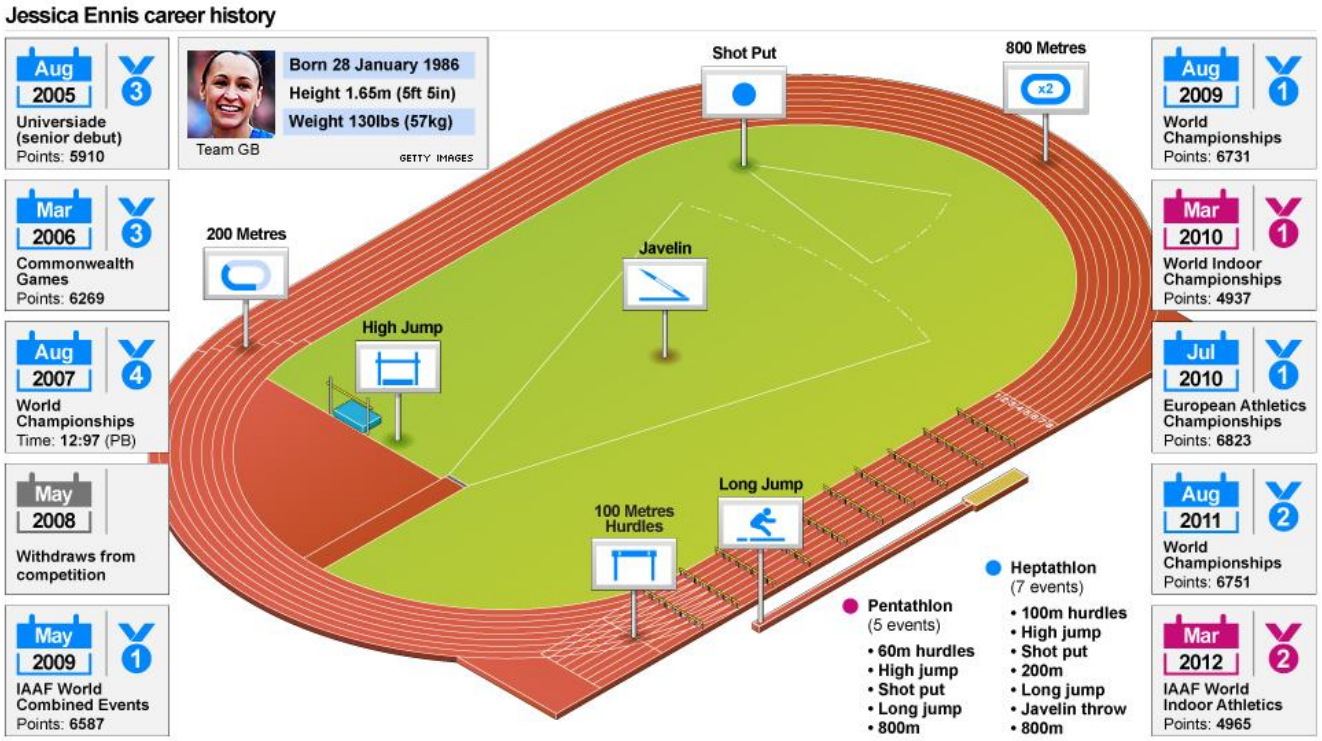
Beispiel 2: Scree-Plot



- Die ersten ca. 10 PCs haben grosses PVE; danach flacht Kurve ab
- Mit ca. 30 PCs hat man 80% der Varianz erklärt
- Zum Vergleich: die restlichen PCs erklären nur noch 20% der Varianz

Beispiel 3: Siebenkampf

Wie erstellt man einen eindimensionalen Index, der Subjekte möglichst gut unterscheidet?



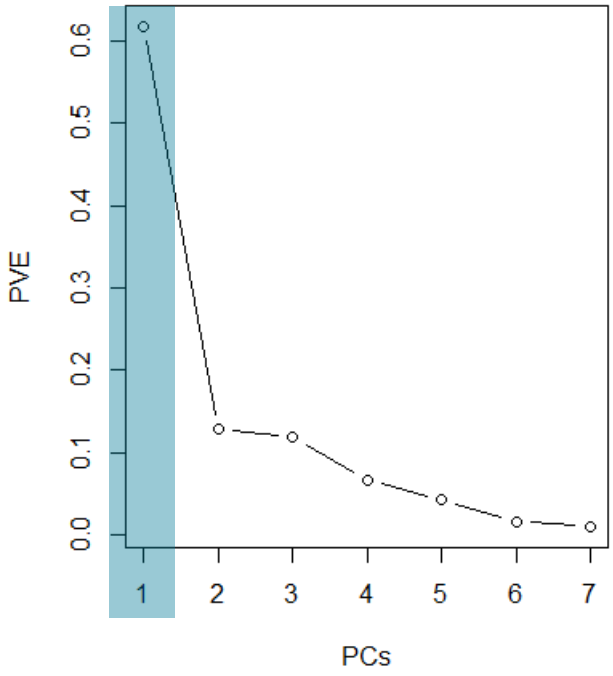
Siebenkampf

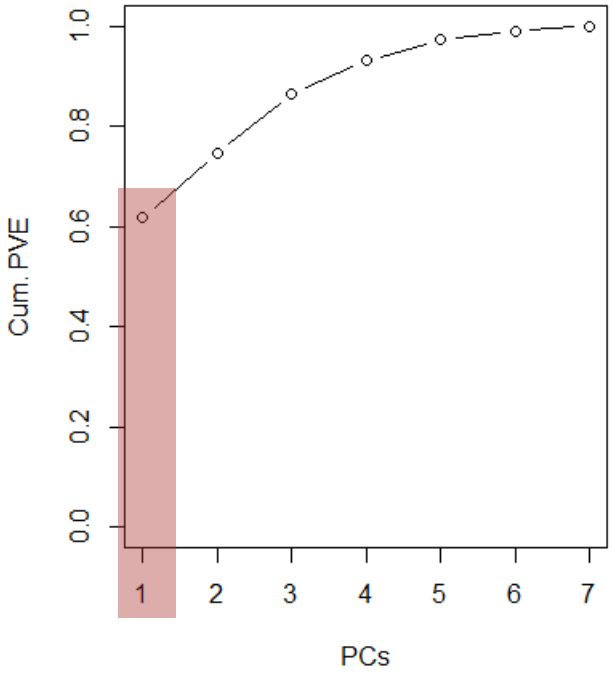
Bsp 3: Korrelationsmatrix

```
> cor(dat2)
           hurdles  highjump      shot   run200m  longjump   javelin   run800m
hurdles  1.0000000 0.5817409 0.7666860 0.8300371 0.8893472 0.3324779 0.5587794
highjump 0.5817409 1.0000000 0.4646854 0.3909024 0.6626910 0.3480793 0.1523350
shot     0.7666860 0.4646854 1.0000000 0.6694330 0.7840380 0.3430333 0.4082925
run200m  0.8300371 0.3909024 0.6694330 1.0000000 0.8106176 0.4707969 0.5731902
longjump 0.8893472 0.6626910 0.7840380 0.8106176 1.0000000 0.2870826 0.5233809
javelin  0.3324779 0.3480793 0.3430333 0.4707969 0.2870826 1.0000000 0.2559348
run800m  0.5587794 0.1523350 0.4082925 0.5731902 0.5233809 0.2559348 1.0000000
```

Bsp 3: Scree-Plot

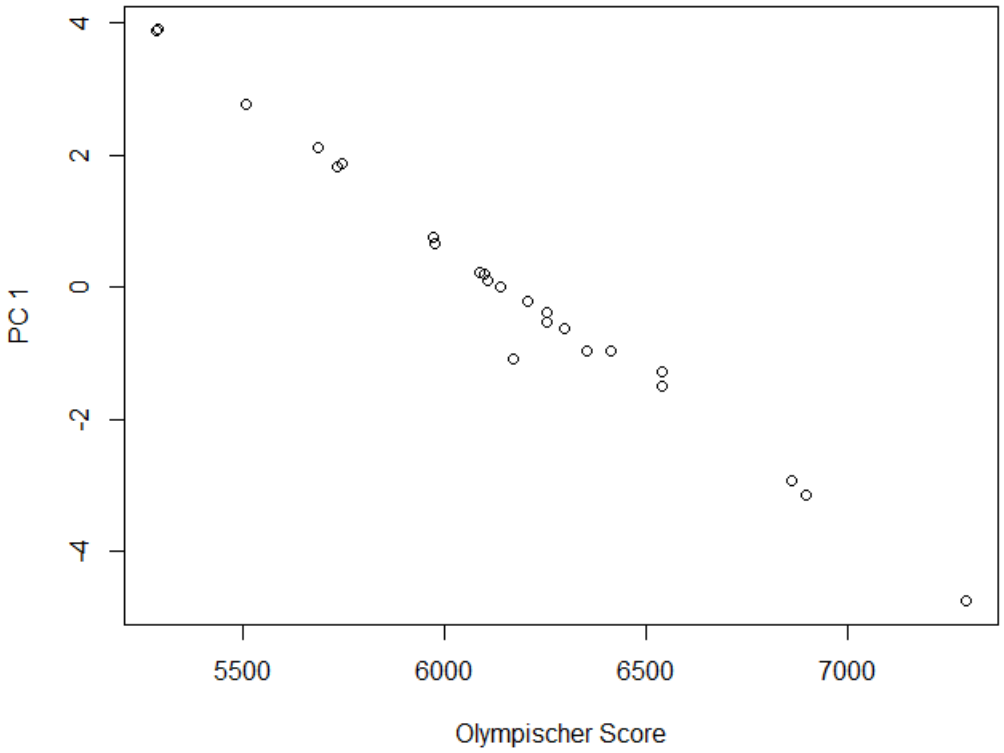
PC 1 ist die “Richtung”, in der die Punkte am meisten streuen → ideal für Ranking





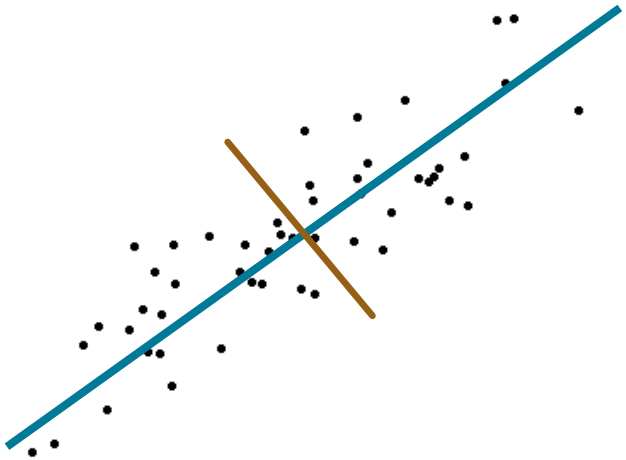
PC 1 erklärt schon über 60% der Varianz !

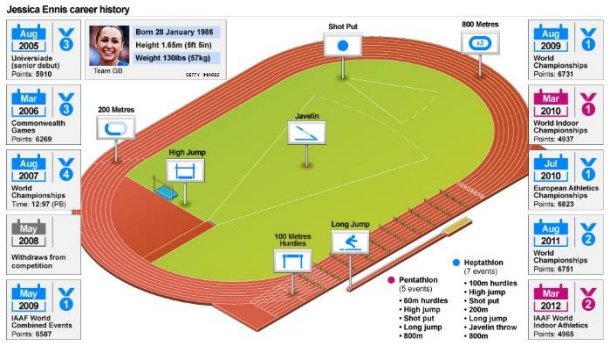
PC 1 vs. Olympischer Score



PC 1 gibt den olympischen Score (mit kleinen Ausnahmen) gut wieder.

PCA




Jessica Ennis career history
Born 28 January 1986
Height 1.85m (5ft 9in)
Weight 130lbs (57kg)
Team GB
Shot Put
800 Metres
200 Metres
Javelin
High Jump
Long Jump
100 Metres Hurdles
Heptathlon
(7 events)
• 100m hurdles
• High jump
• Shot put
• 200m
• Long jump
• Javelin throw
• 800m
Pentathlon
(5 events)
• 60m hurdles
• High jump
• Shot put
• Long jump
• 800m