## **H ΜΕΘΟΔΟΣ PCA (Principle Component Analysis)**

Η μέθοδος PCA (Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών), αποτελεί μία γραμμική υέθοδο συμπίεσης Δεδομένων οποία συνίσταται n από TOV επαναπροσδιορισμό των συντεταγμένων ενός συνόλου δεδομένων σε ένα άλλο σύστημα συντεταγμένων το οποίο θα είναι καταλληλότερο στην επικείμενη ανάλυση δεδομένων. Αυτές οι νέες συντεταγμένες είναι το αποτέλεσμα ενός γραμμικού συνδυασμού προερχόμενου από τις αρχικές μεταβλητές και εκπροσωπούνται σε ορθογώνιο άξονα, ενώ τα επικείμενα σημεία διατηρούν μια φθίνουσα σειρά όσο αφορά στη τιμή της διακύμανσής τους. Για το λόγο αυτό, το πρώτο κύριο συστατικό (principal component) διατηρεί περισσότερες πληροφορίες δεδομένων σε σύγκρίση με το δεύτερο το οποίο δεν διατηρεί πληροφορίες οι οποίες έχουν εισέλθει νωρίτερα (στο πρώτο συστατικό). Τα principal components δεν συσχετίζονται.

Η συνολική ποσότητα των principal components είναι ίση με τη ποσότητα των αρχικών μεταβλητών και παρουσιάζει τις ίδιες πληροφορίες στατιστικής. Εντούτοις, η συγκεκριμένη μέθοδος επιτρέπει την μείωση του συνόλου των μεταβλητών, καθώς τα πρώτα συστατικά (principal componets) διατηρούν περισσότερο από το 90% των στατιστικών δεδομένων από τα αρχικά δεδομένα. Λόγω αυτών των σημαντικών πλεονεκτημάτων, η μέθοδος αυτή είναι ευρέως διαδεδομένη στην συμπίεση εικόνας.

Στη συνέχεια, παραθέτουμε τα βήματα που απαιτούνται για τη μέθοδο αυτή.

## 3.1 Τα βήματα της μεθόδου

## ΒΗΜΑ 1ο : Λήψη των Δεδομένων

Χρησιμοποιούμε τον δικό μας αυτοσχέδιο διδιάστατο πίνακα δεδομένων που παρατίθεται στη συνέχεια, προκειμένου να δείξουμε τις μετατροπές που κάνουμε σε κάθε βήμα προκειμένου να επιτύχουμε τη συμπίεση κατά PCA.

#### Data =

X Y

2.5 2.4

0.5 0.7

2.2 2.9

1.9 2.2

3.1 3.0

2.3 2.7

2 1.6

1 1.1

1.5 1.6

1.1 0.9

## ΒΗΜΑ 2ο : Αφαίρεση του μέσου όρου

Προκειμένου να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος της PCA κατάλληλα, θα πρέπει να αφαιρεθεί ο μέσος όρος από κάθε μία από τις διαστάσεις του πίνακα των στοιχείων. Ο μέσος όρος ο οποίος αφαιρείται είναι ο μέσος όρος των στοιχείων κάθε διάστασης. Επομένως όλες οι τίμες των  $\mathbf{x}$  έχουν ως μέσο όρο το  $\overline{x}$ 

ο οποίος αφαιρείται από κάθε μία, ανάλογως και όλες οι  $\mathbf{y}$  τιμές έχουν μέσο όρο την τιμή  $\frac{1}{y}$  η οποία και αυτή αφαιρείται από κάθε μία. Η διαδικασία αυτή παράγει ένα σύνολο δεδομένων με μέσο όρο ίσο με το μηδέν.

DataAdjust =	
X	Υ
0.69	0.49
-1.31	-1.21
0.39	0.99
0.09	0.29
1.29	1.09
0.49	0.79
0.19	-0.31

-0.81

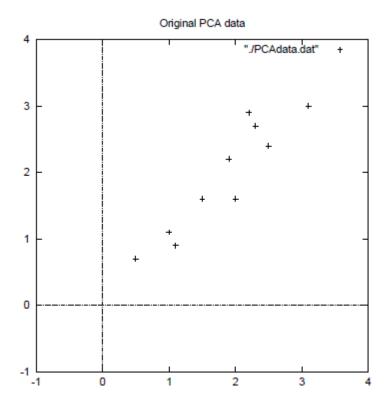
-0.31

-0.71

-0.81

-0.31

-1.01



Εικόνα 1: Παράδειγμα δεδομένων με PCA, αρχικά δεδομένα αριστερά, τελικά (με αφαίρεση του μέσου όρου) δεξιά

## ΒΗΜΑ 3ο : Υπολογισμός του πίνακα Συνδιακύμανσης

Το παρακάτω βήμα γίνεται με τον τρόπο που περιγράφουμε αναλυτικά στην παράγραφο. Καθώς έχουμε στη διάθεση μας δισδιάστατα δεδομένα, ο πίνακας συνδιακύμανσης θα έχει μέγεθος 2×2. Επομένως το αποτέλεσμα έχει την παρακάτω μορφή:

$$cov = \begin{pmatrix} 0.616555556 & 0.615444444 \\ 0.615444444 & 0.716555556 \end{pmatrix}$$

Δεδομένου ότι τα στοιχεία που δεν βρίσκονται στη διαγώνιο του πίνακα είναι θετικά, θα πρέπει να περιμένουμε πως και οι δύο μεταβλητές *x*, *y* θα αυξάνονται μαζί.

BHMA 40 : Υπολογισμός των ιδιοδιανυσμάτων και των ιδιοτιμών ενός πίνακα συνδιακύμανσης

Καθώς ο πίνακας συνδιακύμανσης είναι τετραγωνικός, είναι δυνατός ο υπολογισμός των ιδιοτιμών και των ιδιοδιανυσμάτων αυτού. Τα μεγέθη αυτά είναι πραγματικά σημαντικά, καθώς μέσω αυτών λαμβάνουμε χρήσιμες πληροφορίες για τα προς μελέτη στοιχεία.

Παρακάτω διαφαίνονται οι ιδιοτιμές (eigenvalues) και τα ιδιοδιανύσματα (eigenvectors):

Eigenvalues = 
$$\begin{pmatrix} 0.04908339891 \\ 0.28402771 \end{pmatrix}$$
 eigenvectors = 
$$\begin{pmatrix} -0.735178656 - 0.677873399 \\ 0.677873399 - 0.735178656 \end{pmatrix}$$

Είναι σημαντικό να αναφέρουμε πως τα ιδιοδιανύσματα αυτά είναι και τα δύο μοναδιαία, δηλαδή το μήκος τους είναι ίσο με τη μονάδα. Αυτό είναι πράγματι πολύ σημαντικό για την PCA, αλλά ευτυχώς σχεδόν τα περισσότερα μαθηματικά πακέτα προγραμμάτων υπολογίζουν τα ιδιοδιανύσματα -όταν αυτά ζητούνται-, ως μοναδιαία ιδιοδιανύσματα.

Εάν κοιτάξουμε την πλοκή των δεδομένων θα διαπιστώσουμε πώς όπως προβλεπόταν από τον πίνακα συνδιακύμανσης, τα ιδιοδιανύσματα όντως αυξάνονται μαζί. Στην κορυφή των δεδομένων απεικονίζονται επίσης και δύο ιδιοδιανύσματα. Εμφανίζονται στο διάγραμμα ως μια γραμμή διαγώνιες διακεκομμένες γραμμές. Όπως έχει ήδη επισημανθεί και παραπάνω τα ιδιοδιανύσματα είναι ορθογώνια μεταξύ τους.

Όμως εξίσου σημαντική είναι η δυνατότητα που μας δίνουν σχετικά με τα πρότυπα των στοιχείων, αφού όπως φαίνεται ένα από τα ιδιοδιανύσματα διέρχεται από τη μέση των σημείων, σαν να πρόκειται να σχεδιάζει μια γραμμή η οποία ταιριάζει με το βέλτιστο τρόπο ανάμεσα στα στοιχεία. Το επικείμενο ιδιοδιάνυσμα μας δείχνει πως αυτά τα δύο σύνολα δεδομένων σχετίζονται κατά μήκος αυτής της γραμμής. Το δεύτερο ιδιοδιάνυσμα μας δίνει το δεύτερο σημαντικό πρότυπο των δεδομένων, κατά το οποίο όλα τα στοιχεία είναι ακολουθούν την κύρια γραμμή αλλά και απέχουν από αυτή κατά ένα ποσό.

Επομένως μέσω της διαδικασίας υπολογισμού των ιδιοδιανυσμάτων ενός πίνακα συνδιακύμανσης, μας δίνεται η δυνατότητα απεικόνισης γραμμών στο χώρο οι οποίες φέρουν πληροφορίες σχετικά με τα στοιχεία μας. Το υπόλοιπο των βημάτων περιλαμβάνει τη μετατροπή των δεδομένων έτσι ώστε να είναι εκφρασμένα σε αυτές τις γραμμές.

BHMA 5ο : Επιλογή των στοιχείων που θα αποτελέσουν το χαρακτηριστικό διάνυσμα

Σε αυτό το σημείο έρχεται η έννοια της συμπίεσης στοιχείων και της μείωσης των διαστάσεων. Αν λάβουμε υπόψιν τα ιδιοδιανύσματα και τις ιδιοτιμές του προηγούμενου παραδείγματος, θα δούμε ότι οι ιδιοτιμές είναι τελείως διαφορετικές τιμές. Στην πραγματικότητα αποδεικνύεται ότι το ιδιοδιάνυσμα με την υψηλότερη ιδιοτιμή είναι η κύρια συνιστώσα (principal component) του συνόλου των στοιχείων.

Γενικά λοιπόν, όταν υπολογιστούν τα ιδιοδιανύσματα από τον πίνακα συνδιακύμανσης, το επόμενο βήμα είναι η τοποθέτησή τους σε σειρά σύμφωνα με τις αντίστοιχες τιμές των ιδιοτιμών από το μεγαλύτερο στο μικρότερο. Αυτό μας δίνει όλα τα συστατικά αυτά στοιχεία σε σειρά σπουδαιότητας.

Στο σημείο αυτό μπορούμε να αγνοήσουμε τα λιγότερο σημαντικά στοιχεία γιατί μπορεί να χάνουμε κάποιες πληροφορίες, όταν όμως οι ιδιοτιμές είναι μικρού μεγέθους, τότε δεν χάνουμε τόσα πολλά σε πληροφορίες-δεδομένα. Εάν λοιπόν όντως αγνοήσουμε κάποια δεδομένα τότε τα τελικά στοιχεία θα έχουν λιγότερες διαστάσεις από τα αρχικά δεδομένα. Για να είμαστε ακριβείς, εάν αρχικά είχαμε n διαστάσεις στα δεδομένα μας και υπολογίσουμε n ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα και στη συνέχεια επιλέξουμε μόνο p ιδιοδιανύσματα από τα αρχικά, τότε τα τελικά μας δεδομένα θα έχουν μόνο p διαστάσεις.

Στη συνέχεια πρέπει να διαμορφωθεί ένα χαρακτηριστικό διάνυσμα (feature vector), το οποίο στην ουσία είναι ένα όνομα για έναν πίνακα διανυσμάτων. Η κατασκευή του γίνεται τοποθετώντας τα ιδιοδιανύσματα που τελικά

αποφασίζουμε να κρατήσουμε από τη λίστα των ιδιοδιανυσμάτων, και τη διαμόρφωση ενός πίνακα με αυτά τα ιδιοδιανύσματα τοποθετημένα σε στήλες.

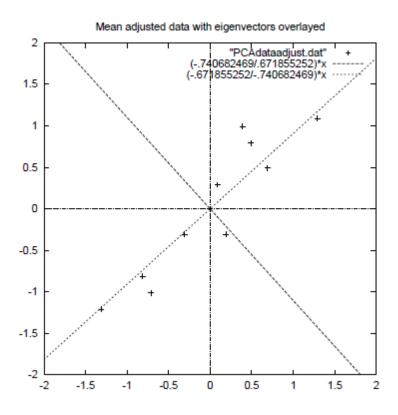
FeatureVector = (eig1 eig2 eig3 ···eign)

Δεδομένου του συνόλου των στοιχείων μας καθώς επίσης και του ότι έχουμε 2 ιδιοδιανύσματα, έχουμε δύο επιλογές: είτε να δημιουργήσουμε ένα χαρακτηριστικό διάνυσμα (feature vector) με την ταυτόχρονη χρησιμοποίηση και των δύο ιδιοδιανυσμάτων:

είτε να επιλέξουμε να παραβλέψουμε το μικρότερο, το λιγότερο σημαντικό στοιχείο προκειμένου τελικά να έχουμε μόνο μία στήλη

$$(-0.677873399 -0.735178656)$$

Το αποτέλεσμα των δύο παραπάνω επιλογών φαίνεται παρακάτω.



Εικόνα 2: Τα δεδομένα μετά την αφαίρεση του μέσου όρου με τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα συνδιακύμανσης στην κορυφή

#### ΒΗΜΑ 6ο : Συλλογή των νέων δεδομένων

Αυτό είναι το τελικό στάδιο της PCA, κατά το οποίο συλλέγουμε τα τελικά δεδομένα. Όταν θα έχουμε επιλέξει τα στοιχεία (eigenvectors), τα οποία επιθυμούμε να διατηρήσουμε στα τελικά δεδομένα μας και έχουμε σχηματίσει το χαρακτηριστικό διάνυσμα, μπορούμε ύστερα να αντιμεταθέσουμε το διάνυσμα, δηλαδή να πάρουμε το ανάστροφό του και στη συνέχεια να το πολλαπλασιάσουμε από την αριστερή του πλευρά του πρότυπου συνόλου δεδομένων, αντιμεταθετιμένο.(δηλ. Με το ανάστροφό του)

#### FinalData = RowFeatureVector X RowDataAdjust

Το RowFeatureVector, αντιστοιχεί σε έναν πίνακα με ιδιοδιανύσματα σε στήλες ανάστροφο, ούτως ώστε τα εν λόγω ιδιοδιανύσματα να βρίσκονται στις γραμμές του πίνακα, με τα περισσότερο σημαντικα ιδιοδιανύσματα να βρίσκονται στη κορυφή της. Ενώ ο όρος RowDataAdjust αντιστοιχεί στα μέσα δεδομένα αντιμεταθετιμένα, δηλαδή τα στοιχεία των δεδομένων βρίσκονται σε κάθε στήλη, με κάθε γραμμή να έχει ξεχωριστή διάσταση.

Τέλος ο όρος FinalData ισούται με το τελικό σύνολο δεδομένων, με στήλες τα στοιχεία των δεδομένων και γραμμές τις διαστάσεις τους.

Ο συγκεκριμένος πίνακας λοιπόν θα μας δώσει τα πρότυπα δεδομένα με αποκλειστική αντιστοιχία στα διανύσματα που τελικά επιλέξαμε. Τα πρότυπα δεδομένα μας έχουν δύο άξονες συγκεκριμένα τους x, y, ούτως ώστε τα δεδομένα μας να βρίσκονται σε αντιστοιχία με τα σημεία των αξόνων. Είναι πιθανή οποιαδήποτε αντιστοίχιση με όποιους δύο άξονες προτιμούμε, στην περίπτωση που οι επιλεγμένοι άξονες είναι μεταξύ τους κάθετοι τότε η έκφραση είναι περισσότερο αποδοτική. Για αυτό καθορίζεται ως τόσο σημαντική η καθετότητα των ιδιοδιανυσμάτων μεταξύ τους. Έχουμε μετατρέψει τα δεδομένα μας από σημεία των x,y αξόνων σε στοιχεία δισδιάστατων ιδιοδιανυσμάτων. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει στη περίπτωση που έχουμε μειώσει τα δεδομένα μας -καθώς έχουμε επιλέξει μέρος αυτών-

και επομένως και τις διαστάσεις τους έχουμε αφήσει κάποια ιδιοδιανύσματα έξω, τα νέα δεδομένα είναι σε αντιστοιχία με τα διανύσματα τα οποία έχουμε αποφασίσει να κρατήσουμε.

Προκειμένου να γίνει εμφανής η παραπάνω μείωση στα δεδομένα μας, πραγματοποιείται ακολούθως η τελική μεταμόρφωση με κάθε ένα από τα πιθανά χαρακτηριστικά διανύσματα. Έτσι λάβαμε το αντιμεταθετιμένο αποτέλεσμα σε κάθε πιθανή περίπτωση προκειμένου να φέρουμε τα δεδομένα στην αρχική διαμορφωμένη μορφή του πίνακα.

Επιπροσθέτως έχει πραγματοποιηθεί και μία γραφική απεικόνιση προκειμένου να δειχθεί πως σχετίζονται τα τελικά σημεία με τα στοιχείαιδιοδιανύσματα.

Στη περίπτωση που επιλεχθούν και τα δύο ιδιοδιανύσματα για την επικείμενη μεταμόρφωση, τότε λαμβάνουμε τα δεδομένα και το γράφημα της Εικόνας 7. Το γράφημα αυτό απεικονίζει στην ουσία το πρότυπο των δεδομένων, το οποίο έχει περιστραφεί έτσι ώστε τα ιδιοδιανύσματα να αποτελούν τους άξονες. Το γεγονός αυτό είναι κατανοητό καθώς δεν έχουμε παραλείψει κανένα δεδομένο σε αυτήν την αποδόμηση-διάσπαση.

Η άλλη μεταμόρφωση η οποία δύναται να λάβει χώρα είναι αυτή η οποία έχει προκύψει κατόπιν επιλογής ιδιοδιανυσμάτων με τη μεγαλύτερη ιδιοτιμή. Ο πίνακας των δεδομένων ο οποίος έχει υπολογισθεί ύστερα από αυτή την επιλογή είναι ο πίνακας Transformed Data (Single eigenvector)

και έχει μόνο μια διάσταση. Εάν αντιπαραβάλλουμε το σύνολο των δεδομένων με το σύνολο το οποίο προέκυψε από τη χρήση και των δύο ιδιοδιανυσμάτων, θα διαπιστώσουμε πως το επικείμενο σύνολο των δεδομένων είναι ακριβώς ταυτόσημο με τη πρώτη στήλη του άλλου. Επομένως εάν επρόκειτο να σχεδιάζαμε τα συγκεκριμένα δεδομένα, θα ήταν μονοδιάστατα και σημεία μιας γραμμής σε ακριβώς x θέσεις των σημείων απεικόνισης της Εικόνας 7. Συμπερασματικά λοιπόν έχουμε εξαλείψει έναν ολόκληρο άξονα, ο οποίος αντιπροσώπευε το δεύτερο ιδιοδιάνυσμα. Στην ουσία έχουμε μετασχηματίσει τα προς μελέτη δεδομένα μας ούτως ώστε να υπάρχει αντιστοιχία μεταξύ των προτύπων, όπου τα πρότυπα είναι οι γραμμές εκείνες οι οποίες αποδίδουν στο μέγιστο δυνατό τη σχέση αυτή μεταξύ των δεδομένων. Το γεγονός αυτό είναι χρήσιμο καθώς με τη διαδικασία αυτή έχουμε ταξινομήσει τα δεδομένα μας σε έναν χώρο ο οποίος καθορίζεται από το συνδυασμό συνεισφορών κάθε γραμμής. Στην αρχή

είχαμε απλώς τους άξονες **χ,y**. Το γεγονός αυτό ως αποτέλεσμα κρίνεται καλό, όμως οι **χ, y** τιμές κάθε δεδομένου –του προκυπτώμενου χώρου- δεν μας δίνουν ικανοποιητικές πληροφορίες σχετικά με το πώς ο εν λόγω χώρος συνδέεται με το υπόλοιπο σύνολο των δεδομένων. Τώρα οι τιμές των δεδομένων του χώρου μας καθορίζουν επακριβώς προς τα πού τείνουν (δηλαδή κάτω ή πάνω) οι προκυπτόμενες γραμμές του χώρου. Στην περίπτωση της μετατροπής με τη χρήση και των δύο ιδιοδιανυσμάτων, έχουμε στην ουσία τροποποιήσει τα δεδομένα, ούτως ώστε να πραγματοποιείται σε αντιστοιχία με τα ιδιοδιανυσμάτα σε αντίθεση με τους συνήθεις άξονες. Αντίθετα, το μονοδιάστατο ιδιοδιάνυσμα της αποσύνθεσης έχει αποσιοποιηθεί από τη συνεισφορά εξαιτίας της ύπαρξης του μικρότερου ιδιοδιανύσματος, με αποτέλεσμα να μείνουμε με τα δεδομένα εκείνα τα οποία είναι σε αντιστοιχία με το προηγούμενο-μεγαλύτερο ιδιοδιάνυσμα.

## ΒΗΜΑ 7ο: Επαναφορά των αρχικών δεδομένων

Μετά από την συμπίεση των δεδομένων μας κατά PCA, θέλουμε να τα αποσυμπιέσουμε ώστε να πάρουμε τα αρχικά μας δεδομένα και να υπολογίσουμε το σφάλμα συμπίεσης.

X Y

-0.827970186 -0.175115307

1.77758033 0.142857227

-0.992197494 0.384374989

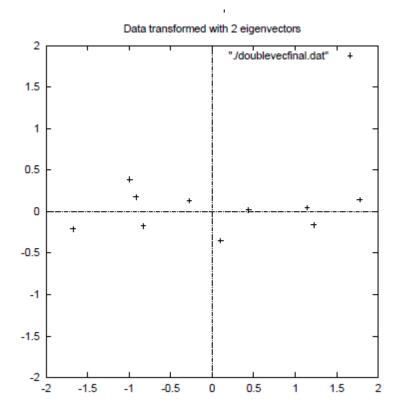
-0.274210416 0.130417207

-1.67580142 -0.209498461 = Transformed Data

-0.912949103 0.175282444

0.0991094375 -0.349824698

 1.22382056 -0.162675287



Εικόνα 3: Τα νέα δεδομένα μετά τη συμπίεση με PCA, με χρησιμοποίηση όλων των ιδιοδιανυσμάτων

Transformed Data (Single eigenvector)

- -0.827970186
- 1.77758033
- -0.992197494
- -0.274210416
- -1.67580142
- -0.912949103
- 0.0991094375
- 1.14457216
- 0.438046137

Είναι προφανές πως μόνο εάν κάνουμε χρήση όλου του συνόλου των ιδιοδιανυσμάτων στην εν λόγω μετατροπή μας θα λάβουμε επακριβώς το σύνολο των αρχικών δεδομένων. Στη περίπτωση όμως που έχουμε μειώση του αριθμού των ιδιοδιανυσμάτων τότε τα δεδομένα που θα επαναφέρουμε θα έχουν προφανώς κάποια απώλεια πληροφοριών.

Ας υπενθυμίσουμε τον τύπο της τελικής μετατροπής :

#### FinalData = RowFeatureVector X RowDataAdjust

ο οποίος προκειμένου να λάβουμε την αρχική μορφή των δεδομένων, αντιστρέφεται και παίρνει τη μορφή:

## RowDataAdjust = RowFeatureVector<sup>-1</sup> X FinalData

όπου RowFeatureVector -1 είναι ο αντιστραμένος όρος RowFeatureVector.

Ωστόσο όταν λαμβάνουμε όλα τα ιδιοδιανύσματα στο χαρακτηριστικό μας διάνυσμα (feature vector), προκύπτει πως το αντίστροφο του χαρακτηριστικού διανύσματος είναι στην ουσία ίσο με το ανάστροφο χαρακτηριστικό διάνυσμα. Αυτό ισχύει γιατί τα στοιχεία του πίνακα είναι όλα μοναδιαία ιδιοδιανύσματα του συνόλου των δεδομένων μας. Αυτό καθιστά τη διαδικασία της επιστροφής του αρχικού συνόλου των δεδομένων ευκολότερη, καθώς η εξίσωση παίρνει τελικά τη μορφή:

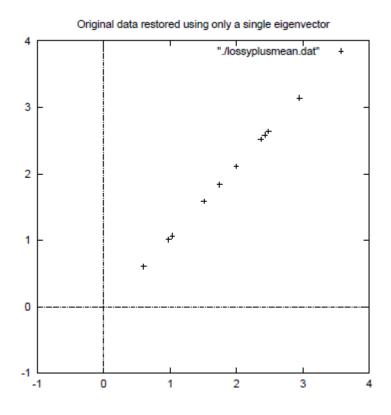
## $RowDataAdjust = RowFeatureVector^{T} \times FinalData$

Ωστόσο για να πάρουμε τα αρχικά δεδομένα, χρειαζόμαστε την πρόσθεση του μέσου όρου των πρωτογενών δεδομένων (καθώς όπως θυμόμαστε τον είχαμε αφαιρέσει προηγουμένως). Έτσι ο πλήρης τύπος δίνεται από την έκφραση που ακολουθεί:

# $RowOriginalData = (RowFeatureVector^T \times FinalData) + OriginalMean$

Ο τύπος αυτός ισχύει και για τις περιπτώσεις εκείνες που δεν έγινε χρήση όλων των ιδιοδιανυσμάτων στον επικείμενο υπολογισμό του χαρακτηριστικού διανύσματος (feature value).

Όσον αφορά στην επανάκτηση των δεδομένων με τη χρήση της πλήρους μορφής του χαρακτηριστικού διανύσματος, το αποτέλεσμα είναι ταυτόσημο με τα δεδομένα τα οποία παρατέθηκαν αρχικά. Ωστόσο, κάνοντας τον υπολογισμό με το μειωμένο χαρακτηριστικό διάνυσμα, είναι πιο εμφανής η απώλεια των πληροφοριών. Στην Εικφαίνεται η εν λόγω απεικόνιση. Συγκρίνοντάς τη με τη γραφική παράσταση των αρχέγονων-πρότυπων δεδομένων, (Εικόνα 5) βλέπουμε πώς, ενώ η παραλλαγή κατά μήκος του ιδιοδιανύσματος-eigenvector (δείτε την Εικόνα 6 σύμφωνα με την οποία το ιδιοδιάνυσμα- eigenvector βρίσκεται πάνω από το μέσο-προσαρμοσμένο σύνολο των δεδομένων) έχει διατηρηθεί, η παραλλαγή κατά μήκος του άλλου συστατικού (το άλλο eigenvector το οποίο παραλείψαμε από τη διαδικασία) έχει εξαλειφθεί.



Εικόνα 4: Η επανφορά των δεδομένων χρησιμοποιώντας ένα μόνο ιδιοδιάνυσμα