Principal Component Analysis: dalla teoria alla pratica

Marco Buracchi

Università degli studi di Firenze

26 febbraio 2018

Sommario

Università degli Studi Firenze

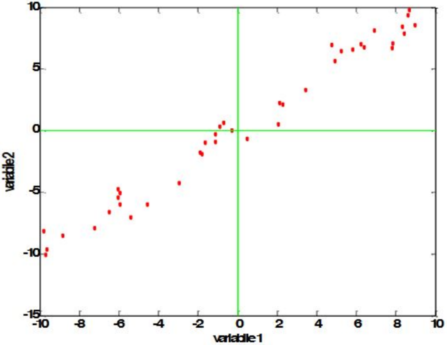
Cenni di teoria

UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
FIRENZE

PCA

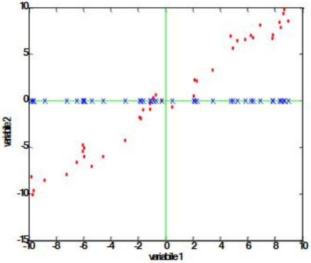
- Trasformazione lineare della matrice dei dati $\mathcal{X}$
- Misurazione della variazione delle variabili utilizzando un numero minore di ”fattori”
- Trasportare il problema in uno spazio k-variato (generalmente bi-trivariato)
- Semplificazione di visualizzazione e lettura dei dati

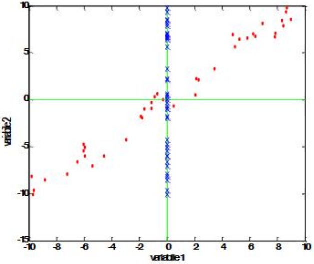
Esempio



- 40 campioni
- 2 variabili

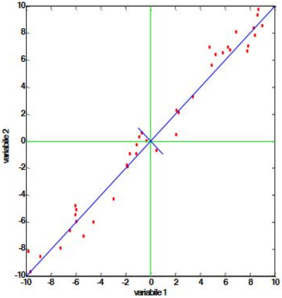
Esempio - 2

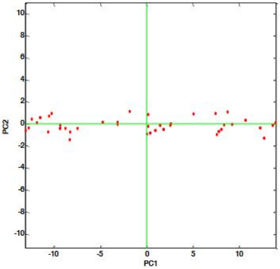




- Nessuna delle due variabili descrive completamente la variabilità dei dati

Componenti





- Prendiamo come componenti principali le linee blu
- La prima componente spiega la massima percentuale di variabilità rappresentabile in una dimensione

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Varianza

- Questa percentuale di variabilità può essere calcolata tramite la varianza
- La varianza è un indice della dispersione dei dati lungo una particolare direzione
- La varianza è indipendente dal sistema di riferimento
- Ruotare gli assi mantiene inalterata la varianza totale

Componenti

- La prima componente cattura quasi tutta la variabilità presente nei dati (99.83%)
- La seconda descrive la rimanente (0.17%)
- Generalizzando, le componenti principali successive spiegano una sempre minore percentuale della variabilità originale
- Le ultime componenti principali descrivono principalmente rumore

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Funzionamento

1. Standardizzazione
   - Standardizzare i dati (media = 0, varianza = 1)
   - Possiamo lavorare con variabili su scale e unità di misure differenti
2. Calcolo covarianza/correlazione
   - Calcoliamo la matrice S di covarianza

$$\mathcal{S} = \frac{1}{n-1} \sum_{1}^{n} (x - \mu)(x - \mu)^T$$

   - Possiamo usare anche la matrice di correlazione
3. Calcolo autovalori/autovettori
   - $\mathcal{S} \times v = \lambda \times v$

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

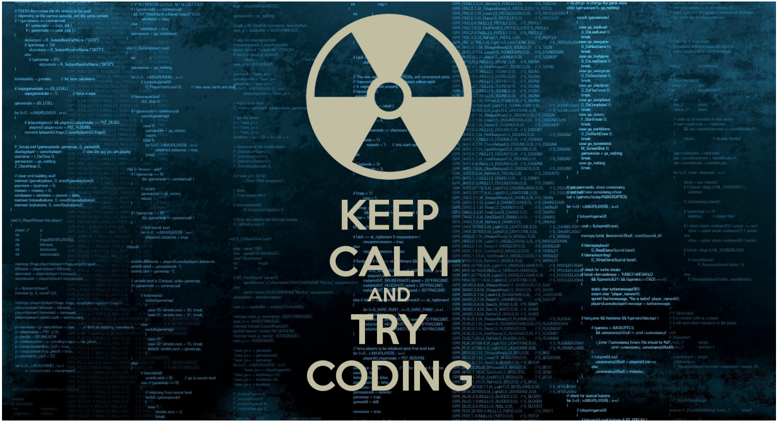
Funzionamento

4. Scelta delle componenti
    - Ordiniamo in maniera decrescente gli autovalori ottenuti
    - Selezioniamo i primi k
    - Costruiamo $\mathcal{W}$, la matrice dei rispettivi autovettori
5. Rotazione dei dati
    - Moltiplichiamo i dati originali per gli autovettori che indicano le direzioni dei nuovi assi (componenti principali)
    - I dati ruotati vengono chiamati *score*

$$Sc = \mathcal{X} \times \mathcal{W}$$

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Implementazione



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Strumenti utilizzati

PANDAS

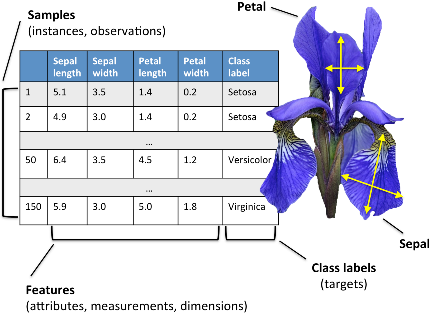
- Libreria Python, open source, ad alte prestazioni e con licenza BSD[1]
- Strutture dati e strumenti per l'analisi facili da usare (R-like)
  - Serie (unidimensionali)
  - Dataframe (bidimensionali)
- Dati organizzati in maniera *relazionale* o *etichettata*
- Sponsorizzato da *NumFocus* (matplotlib, simpy, julia...)

A Fiscally Sponsored Project of NUMFOCUS OPEN CODE = BETTER SCIENCE

- sviluppo continuo, a livello mondiale e sistema di donazioni a supporto

[1] Berkeley Software Distribution

Dataset



- Dataset IRIS
- 150 misurazioni di fiori iris
- 3 diverse specie

Caricamento Dataset

```python
# download dataset
df = pd.read_csv(
    filepath_or_buffer='https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/iris/iris.
        data',
    header=None,
    sep=',')

# scelgo solamente le colonne con i valori di interesse
df.columns=['sepal_len', 'sepal_wid', 'petal_len', 'petal_wid', 'class']
df.dropna(how="all", inplace=True) # Elimina i valori NA
print(df.tail()) #visualizza ultime 5 righe
```

	sepal_len	sepal_wid	petal_len	petal_wid	class
145	6.7	3.0	5.2	2.3	Iris-virginica
146	6.3	2.5	5.0	1.9	Iris-virginica
147	6.5	3.0	5.2	2.0	Iris-virginica
148	6.2	3.4	5.4	2.3	Iris-virginica
149	5.9	3.0	5.1	1.8	Iris-virginica

Divisione valori

- Matrice valori numerici $X \in \mathcal{M}^{150x4}$
- Vettore specie $y \in \mathcal{M}^{150x1}$

```
# X = tabella con valori, y = etichette
X = df.ix[:,0:4].values
y = df.ix[:,4].values
```

Analisi descrittiva

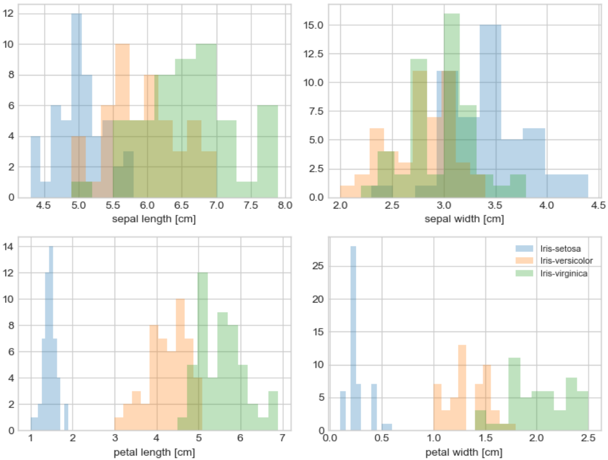
```
# creazione istogrammi
feature_dict = {0: 'sepal length [cm]',
                1: 'sepal width [cm]',
                2: 'petal length [cm]',
                3: 'petal width [cm]'}

with plt.style.context('seaborn-whitegrid'):
    plt.figure(figsize=(8, 6))
    for cnt in range(4):
        plt.subplot(2, 2, cnt+1)
        for lab in ('Iris-setosa', 'Iris-versicolor', 'Iris-virginica'):
            plt.hist(X[y==lab, cnt],
                     label=lab,
                     bins=10,
                     alpha=0.3,)
        plt.xlabel(feature_dict[cnt])
    plt.legend(loc='upper right', fancybox=True, fontsize=8)

    plt.tight_layout()
    plt.show()
```

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Analisi descrittiva



Standardizzazione

- Valori su scale diverse richiedono standardizzazione
- Usiamo la funzione di libreria

```
# normalizzazione dati
X_std = StandardScaler().fit_transform(X)
```

Autovalori e autovettori

```python
# vettore delle medie e matrice di covarianza
mean_vec = np.mean(X_std, axis=0)
cov_mat = (X_std - mean_vec).T.dot((X_std - mean_vec)) / (X_std.shape[0]-1)
print('Matrice di covarianza calcolata: \n%s\n' %cov_mat)

# funzione di libreria
print('Matrice di covarianza NumPy: \n%s\n' %np.cov(X_std.T))
separate()

# calcolo autovalori e autovettori su matrice di covarianza
cov_mat = np.cov(X_std.T)
eig_vals, eig_vecs = np.linalg.eig(cov_mat)
print('Autovettori cov: \n%s\n' %eig_vecs)
print('Autovalori cov: \n%s\n' %eig_vals)
separate()

# calcolo autovalori ed autovettori su matrice di correlazione dati standardizzati
cor_mat1 = np.corrcoef(X_std.T)
eig_vals, eig_vecs = np.linalg.eig(cor_mat1)
print('Autovettori corrSTD: \n%s\n' %eig_vecs)
print('Autovalori corrSTD: \n%s\n' %eig_vals)
separate()
```

Autovalori e autovettori

```python
# calcolo autovalori ed autovettori su matrice di correlazione dati grezzi
cor_mat2 = np.corrcoef(X.T)
eig_vals, eig_vecs = np.linalg.eig(cor_mat2)
print('Autovettori corr: \n%s\n' %eig_vecs)
print('Autovalori corr: \n%s\n' %eig_vals)
separate()

# decomposizione ai valori singolari
u,s,v = np.linalg.svd(X_std.T)
print('Autovettori SVD: \n%s\n' %u)
separate()
```

- In tutti i casi otteniamo la matrice degli autovettori

$$\begin{bmatrix} 0.522 & -0.372 & -0.721 & 0.261 \\ -0.263 & -0.925 & 0.242 & -0.124 \\ 0.581 & -0.021 & 0.140 & -0.801 \\ 0.565 & -0.065 & 0.633 & 0.523 \end{bmatrix}$$

con i rispettivi autovalori

$$\begin{bmatrix} 2.910 & 0.921 & 0.147 & 0.020 \end{bmatrix}$$

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Selezione componenti

- Gli autovettori calcolati forniscono solamente la direzione perché sono tutti a norma unitaria
- Per scegliere i più interessanti ordiniamo i rispettivi autovalori

```
# ordinamento degli autovalori

## creazione coppie (autovalore,autovettore)
eig_pairs = [(np.abs(eig_vals[i]), eig_vecs[:,i]) for i in range(len(eig_vals))]

## Ordinamento dal maggiore al minore
eig_pairs.sort(key=lambda x: x[0], reverse=True)
```

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

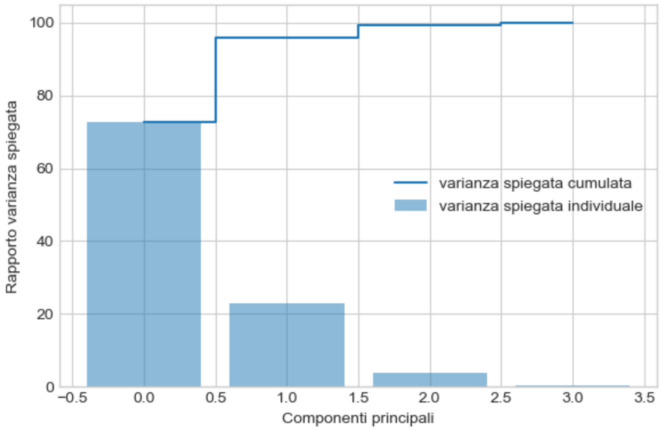
Varianza spiegata

- Calcoliamo la varianza spiegata dalle singole componenti
- Visualizziamo il risultato su un grafico

```
# varianza spiegata
tot = sum(eig_vals)
var_exp = [(i / tot)*100 for i in sorted(eig_vals, reverse=True)]
cum_var_exp = np.cumsum(var_exp)
with plt.style.context('seaborn-whitegrid'):
    plt.figure(figsize=(6, 4))

    plt.bar(range(4), var_exp, alpha=0.5, align='center',
            label='varianza spiegata individuale')
    plt.step(range(4), cum_var_exp, where='mid',
             label='varianza spiegata cumulata')
    plt.ylabel('Rapporto varianza spiegata')
    plt.xlabel('Componenti principali')
    plt.legend(loc='best')
    plt.tight_layout()
    plt.show()
```

Varianza spiegata



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Matrice di proiezione

- Passiamo da 4 a 2 dimensioni
- Estraiamo le prime due componenti dalla matrice degli autovettori

```
# matrice di proiezione
matrix_w = np.hstack((eig_pairs[0][1].reshape(4,1),
                      eig_pairs[1][1].reshape(4,1)))
```

- Creiamo la matrice di proiezione $\mathcal{W}$

$$\begin{bmatrix} \color{red}{0.522} & \color{red}{-0.372} & -0.721 & 0.261 \\ \color{red}{-0.263} & \color{red}{-0.925} & 0.242 & -0.124 \\ \color{red}{0.581} & \color{red}{-0.021} & 0.140 & -0.801 \\ \color{red}{0.565} & \color{red}{-0.065} & 0.633 & 0.523 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathcal{W} = \begin{bmatrix} 0.522 & -0.372 \\ -0.263 & -0.925 \\ 0.581 & -0.021 \\ 0.565 & -0.065 \end{bmatrix}$$

Proiezione

- Proiettiamo nel nuovo sottospazio

$$\mathcal{Y} = \mathcal{X} \times \mathcal{W} \qquad \mathcal{Y} \in \mathcal{M}^{150x2}$$

```
# proiezione nel nuovo spazio
Y = X_std.dot(matrix_w)
```

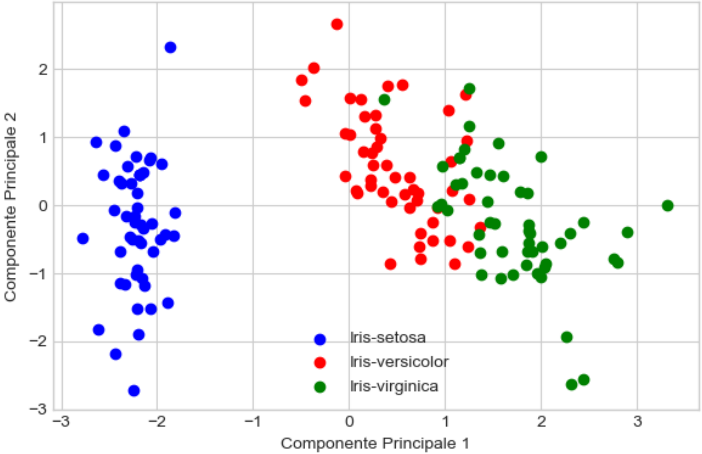
Proiezione

- Proiettiamo nel nuovo sottospazio

$$\mathcal{Y} = \mathcal{X} \times \mathcal{W} \qquad \mathcal{Y} \in \mathcal{M}^{150x2}$$

```
# proiezione nel nuovo spazio
Y = X_std.dot(matrix_w)
```

Risultato



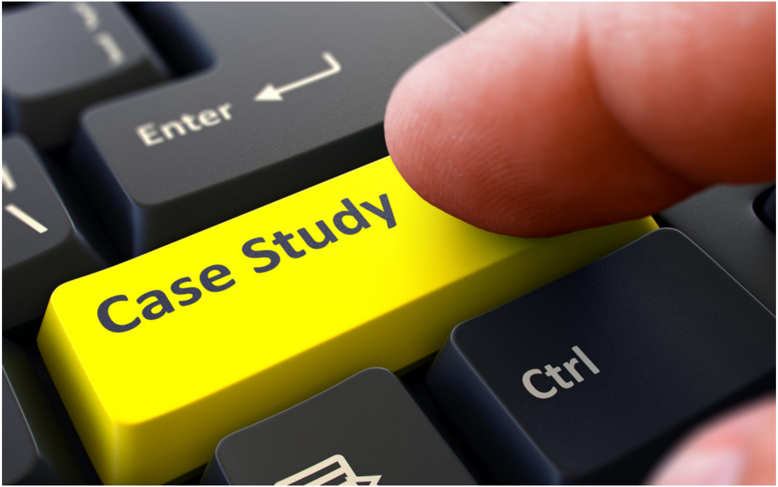
Componente Principale 2
Componente Principale 1
2
1
0
−1
−2
−3
−3
−2
−1
0
1
2
3
Iris-setosa
Iris-versicolor
Iris-virginica

Post Scriptum

- Esiste una funzione di libreria che calcola $\mathcal{Y}$ direttamente da $\mathcal{X}$
- L'unico parametro da fornire è il numero di componenti che si vogliono prendere in considerazione

```
# pacchetto scikit-learn
sklearn_pca = sklearnPCA(n_components=2)
Y_sklearn = sklearn_pca.fit_transform(X_std)
```

Caso di studio



Problema

- Miliardi di dispositivi informatici connessi in rete nel mondo
- Innumerevoli casi di intrusioni malevole in tali sistemi
- Il problema della sicurezza delle reti è molto serio
- I dati relativi al traffico di rete hanno in genere molte dimensioni
- Difficili da visualizzare e analizzare

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Intrusion Detection Systems

IDS

- Gli IDS si dividono in due grandi categorie
  1. Signature based
     - Riconoscono le *firme* degli attacchi noti
     - 100% di successo delle rilevazioni
     - Riconoscono solo attacchi noti
  2. Anomaly based
     - Riconoscono un comportamento diverso dal *normale*
     - Possono riconoscere attacchi nuovi
     - Possono creare falsi allarmi o non riconoscere qualche attacco

Idea

- Possiamo costruire un IDS basato sulla PCA[2]?
- Capiamo un po' meglio come funzionano i principali attacchi

[2] 2006, Labib Khaled and Vemuri V. Rao: An application of PCA to the detection and visualization of computer network attacks

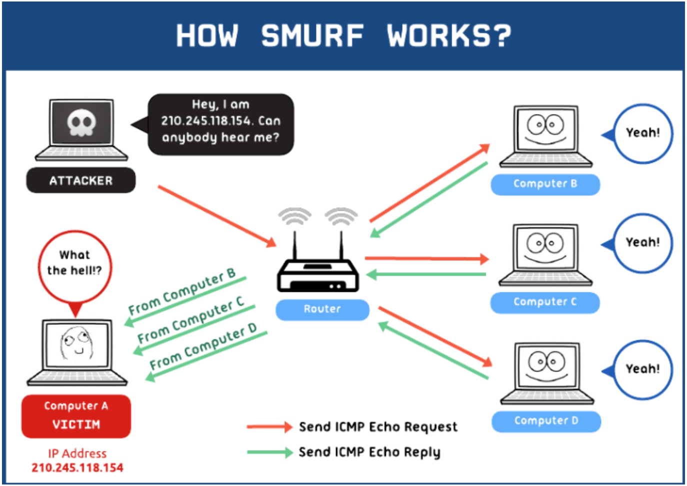
Tipi di attacchi

- Ci focalizzeremo su due tipi di attacchi
  1. Denial of Service (DoS)
     - Si cerca di rendere la risorsa sotto attacco troppo occupata (rete) o piena (memoria) per essere utilizzata
  2. Network Probe (NP)
     - Scansione sistematica di tutti i dispositivi connessi alla rete e delle loro porte di comunicazione

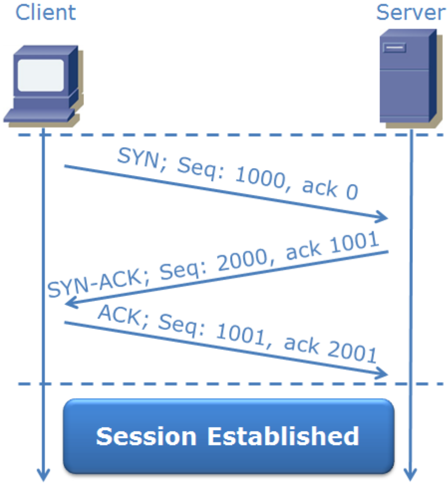
UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Attacchi DoS

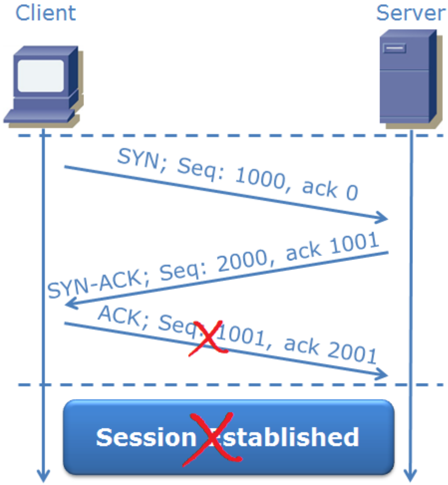
Attacco SMURF



Attacco Neptune



Attacco Neptune



Attacco Neptune

Attacchi NP

- IPSweep
  - Scansione sistematica di tutti gli IP connessi alla rete
- PortSweep
  - Scansione sistematica di tutte le porte di comunicazione dei sistemi scoperti al passo precedente

Analisi dei dati

- 1998 DARPA[3] Intrusion Detection Evaluation data sets
- Utilizzo della rete in 7 settimane
- Presente traffico normale e vari attacchi (tra cui quelli ai quali siamo interessati)
- Preprocessing (estrazione delle intestazioni o *header* dei pacchetti di rete)
- 12 variabili rilevanti

[3] Defense Advanced Research Projects Agency

Esperimento

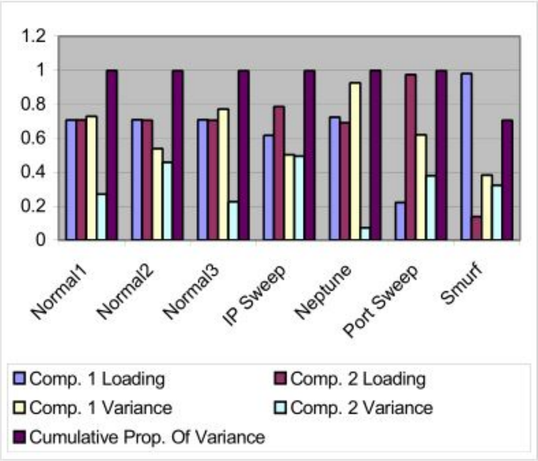
- Creati 7 dataset (uno per ogni attacco e 3 di traffico normale)
- Applicata la PCA ad ognuno di essi per passare da 12 a 2 dimensioni
- Le componenti forniranno la direzione della massima varianza
- I coefficienti della trasformazione (*loading*) ci indicheranno la malignità/benignità del traffico

Loadings

- I loadings forniscono informazioni su quanto ogni variabile influisce sulla relativa componente principale (che è una loro combinazione lineare)
- Focalizzeremo l'attenzione sulle prime due componenti principali e sui relativi loadings

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI FIRENZE

Loadings


1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
Normal1
Normal2
Normal3
IP Sweep
Neptune
Port Sweep
Smurf
Comp. 1 Loading
Comp. 2 Loading
Comp. 1 Variance
Comp. 2 Variance
Cumulative Prop. Of Variance


That's all Folks!