

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI FIRENZE

CORSO DI LAUREA MAGISTRALE IN INFORMATICA

MULTIVARIATE ANALYSIS AND STATISTICAL LEARNING

Principal Component Analysis: dalla teoria alla pratica

Autore:

Marco BURACCHI

Docente:

Prof.ssa Anna GOTTARD

10 febbraio 2018

Indice

1	Principal Component Analysis	2
1.1	Cosa fa?	2
1.1.1	Come funziona?	4
2	Implementazione Python	5
2.1	PANDAS	5
2.2	Implementazione	5
2.2.1	Preparazione dataset	5
2.2.2	Calcolo autovalori e autovettori	8
2.2.3	Selezione delle componenti	8
2.2.4	Matrice di proiezione	10
2.2.5	Proiezione nel nuovo spazio	10
3	Caso di studio	11
4	Codice Python completo	12

1 Principal Component Analysis

La *Principal Component Analysis* (PCA) è un trattamento matematico della matrice dei dati il cui scopo è rappresentare la variazione presente nelle tante variabili utilizzando un numero k molto più piccolo di “fattori” o “componenti principali”. Si costruisce un nuovo spazio su cui rappresentare i campioni ridefinendo gli assi utilizzando le componenti principali al posto delle variabili originali. L’uso di questi nuovi assi permette di rappresentare la vera natura multivariata dei dati in un numero relativamente piccolo di dimensioni e di usare questa rappresentazione per identificare la struttura dei dati stessi.

1.1 Cosa fa?

Supponiamo di aver misurato il valore di due variabili su 40 campioni come in Figura 1

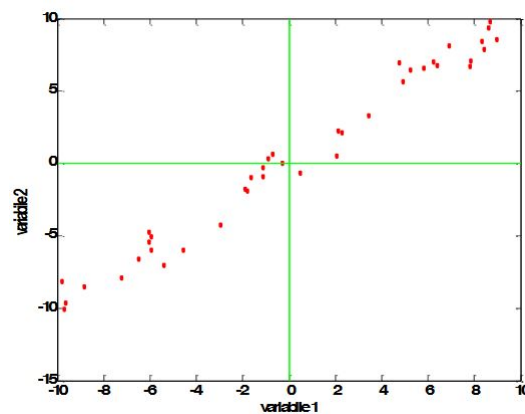


Figura 1: Plot variabili A e B

Vogliamo studiare le relazioni tra i campioni. Le distanze tra i campioni sono usate per definire similarità e differenze. In altre parole, lo scopo della PCA è di descrivere le distanze fra i punti (distribuzione, variabilità) utilizzando il minor numero di dimensioni possibili. Questo scopo si raggiunge costruendo assi che si allineano coi dati. Come si vede dal grafico nessuna delle variabili originali descrive completamente la variabilità all’interno dei dati stessi.

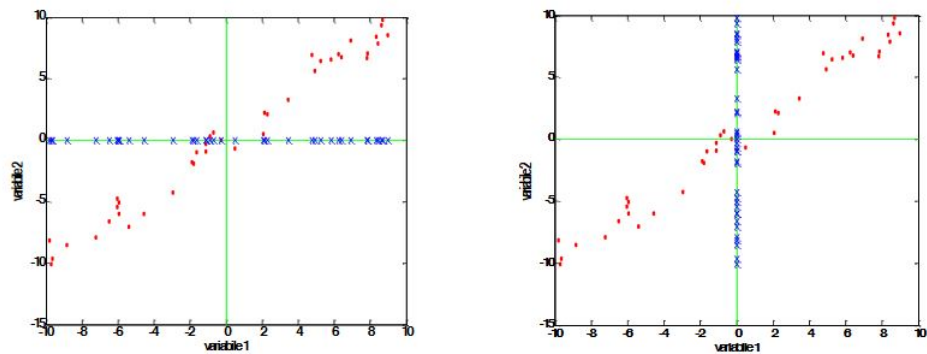


Figura 2: Proiezione variabili A e B

Se prendiamo come componenti principali però, le linee blu in figura 3, la prima componente principale descrive una quantità della variabilità originale maggiore di quella spiegata da ciascuna delle due variabili prese singolarmente. Essa spiega la massima percentuale della variabilità presente nei dati rappresentabile in una sola dimensione. Questa percentuale di variabilità spiegata può essere calcolata attraverso la varianza. La varianza è infatti un indice della dispersione dei dati lungo una particolare direzione ed è indipendente dal sistema di riferimento: una rotazione degli assi mantiene inalterata la varianza totale all'interno dei dati.

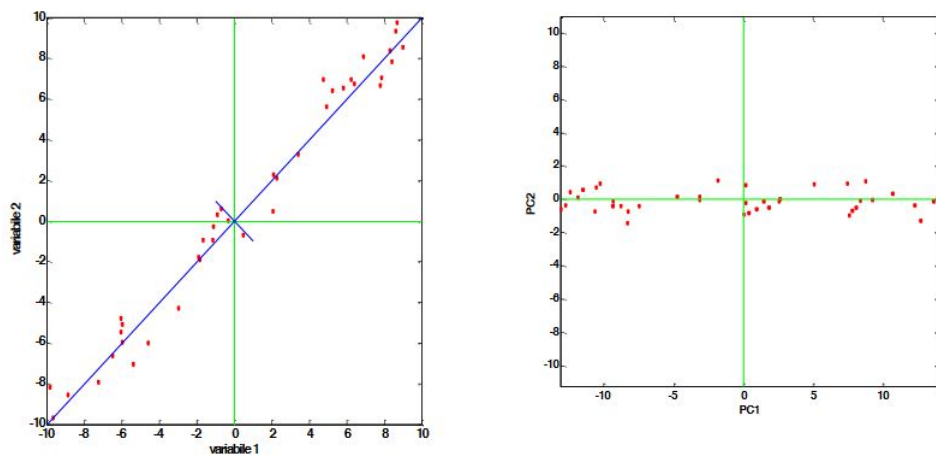


Figura 3: Componenti principali

In questo esempio, la prima componente principale cattura praticamente tutta la variabilità presente nei dati (99.83%) mentre la seconda descrive la rimanente variazione (0.17%). Questa considerazione può essere generalizzata: le componenti principali successive spiegano una sempre minore percentuale della variabilità originale. Seguendo questo principio è possibile dire che le ultime componenti principali descrivono principalmente *rumore*. Come si effettua la PCA?

1.2 Come funziona?

Standardizzazione: Standardizziamo i dati (media = 0 e varianza = 1). In questo modo possiamo lavorare con variabili che hanno scale e unità di misura differenti.

Calcolo della covarianza/correlazione: Calcoliamo la matrice \mathcal{S} di covarianza. La covarianza di due variabili indica quanto le due variabili si muovono insieme.

$$\mathcal{S} = \frac{1}{n-1} \sum_1^n (x - \mu)(x - \mu)^T$$

In alternativa possiamo utilizzare anche la matrice di correlazione.

Calcolo autovalori/autovettori: Calcoliamo gli autovalori e gli autovettori della matrice di covarianza. Per definizione

$$\mathcal{S} \times v = \lambda \times v$$

Ognuno di questi autovettori corrisponde ad un autovalore la cui grandezza indica quanta varianza viene spiegata da quell'autovettore. Ordiniamo quindi gli autovalori in ordine decrescente e prendiamo i primi k . Chiamiamo \mathcal{V} la matrice degli autovettori risultante.

Ruotiamo i dati: Per convertire le osservazioni nel nuovo sistema di assi, moltiplichiamo i dati originali per gli autovettori che indicano la direzione dei nuovi assi (componenti principali). Questi dati ruotati vengono chiamati *score*.

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

Dati ridotti: A questo punto è possibile utilizzare i nuovi dati.

2 Implementazione Python

Passiamo adesso all'implementazione di un piccolo esempio di PCA sul dataset *IRIS*. Per questa realizzazione è stato scelto il linguaggio *Python* con la relativa libreria *pandas*.

2.1 PANDAS

pandas è una libreria Python open-source, ad alte prestazioni e con licenza BSD che fornisce strutture dati e strumenti per l'analisi facili da usare.



È un progetto sponsorizzato da NumFocus. Questo assicura lo sviluppo continuo e a livello mondiale e permette anche di aiutare gli sviluppatori con donazioni o citazioni. Permette di lavorare con dati organizzati in maniera *relazionale* o *etichettata* in maniera intuitiva. Le sue due strutture dati principali sono le serie (unidimensionali) e i dataframe (bidimensionali). Per il nostro

esempio utilizzeremo questa seconda struttura.

2.2 Implementazione

Come già detto, utilizzeremo il dataset *IRIS* che contiene 150 misurazioni di fiori iris di tre specie diverse. La figura 4 schematizza le variabili del dataset che sono:

- Larghezza dei sepali in cm
- Lunghezza dei sepali in cm
- Larghezza dei petali in cm
- Lunghezza dei petali in cm
- Specie (setosa, versicolor, virginica)

2.2.1 Preparazione dataset

Caricamento dataset

Come prima cosa, scarichiamo il dataset dall'archivio della UCI (Università della California) e carichiamolo assegnando i nomi desiderati alle colonne e rimuovendo i valori NA.

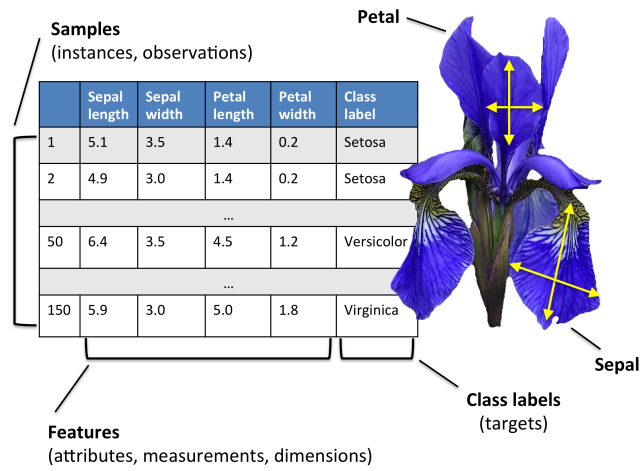


Figura 4: Struttura dataset

```
# 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

Figura 5: Dataset memorizzato

Dopo questi comandi otteniamo il risultato visibile in figura 5. Dividiamo i valori numerici dalla specie creando una matrice $X \in \mathcal{M}^{150 \times 4}$ e un vettore $y \in \mathcal{M}^{150 \times 1}$

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

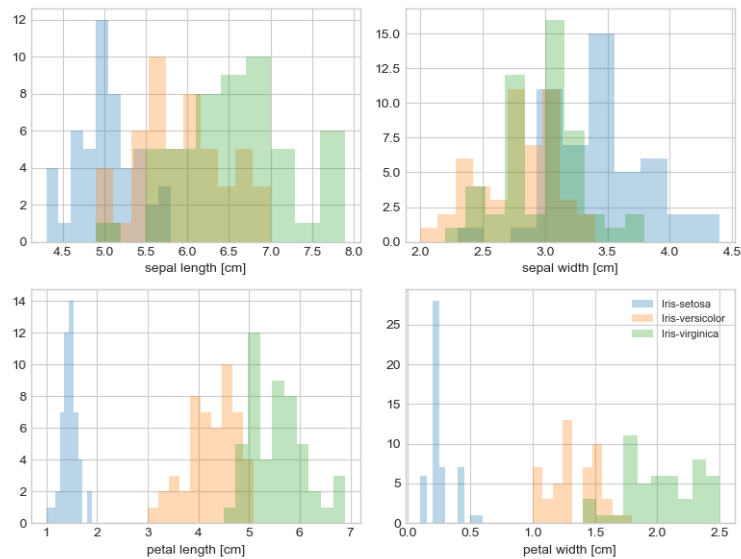


Figura 6: Analisi descrittiva

Analisi descrittiva

Per avere un'idea di come si distribuiscono le tre classi di fiori sulle varie caratteristiche, creiamo qualche istogramma.

```
# 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()
```

Il risultato è visibile in figura 6

Standardizzazione

Standardizziamo i dati in scala unitaria (media = 0 e varianza = 1) per migliorare le performance.

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


2.2.2 Calcolo autovalori e autovettori

Calcoliamo gli autovettori e gli autovalori della matrice di covarianza e della matrice di correlazione. Possiamo calcolarli utilizzando la formula teorica, utilizzando una funzione di libreria oppure applicando la decomposizione a valori singolari. In ogni caso, i risultati saranno gli stessi (tranne nel caso della SVD che differisce solo per alcuni segni dato che la scomposizione è unica a meno di matrici di fase).

```
# 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()

# 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()
```

La matrice che si ottiene è la seguente:

$$\begin{bmatrix} 0.52237162 & -0.37231836 & -0.72101681 & 0.26199559 \\ -0.26335492 & -0.92555649 & 0.24203288 & -0.12413481 \\ 0.58125401 & -0.02109478 & 0.14089226 & -0.80115427 \\ 0.56561105 & -0.06541577 & 0.6338014 & 0.52354627 \end{bmatrix}$$

2.2.3 Selezione delle componenti

Vogliamo ridurre le dimensioni dello spazio delle variabili proiettandolo in un sottospazio più piccolo. I suoi assi saranno gli autovettori appena calcolati. Purtroppo, in questo momento definiscono solamente la direzione perché sono tutti a lunghezza unitaria. Per stabilire quale può essere abbandonato senza perdere troppa informazione controlliamo ed ordiniamo i rispettivi autovalori.

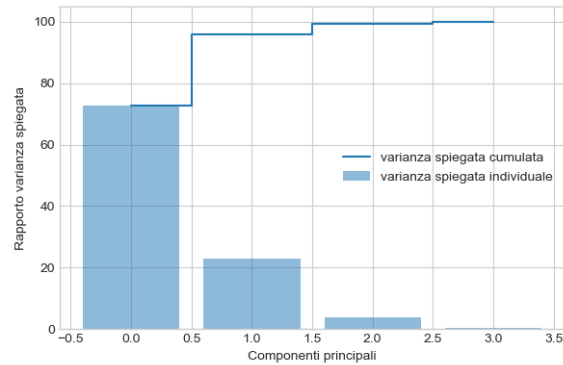


Figura 7: Varianza spiegata

```
# 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)
print('Autovalori ordinati:')
for i in eig-pairs:
    print(i[0])
```

A questo punto calcoliamo la varianza spiegata delle singole componenti e mostriamola in un grafico (Figura 7).

```
# 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()
```

Dal grafico possiamo dedurre che la maggior parte della varianza può essere spiegata dalla prima componente (72.77%). Anche la seconda porta un po' di informazione (23.03%) mentre la terza e la quarta possono tranquillamente essere rimosse senza perdere troppa informazione.

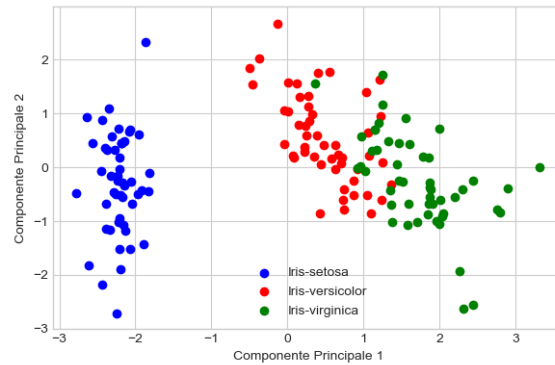


Figura 8: Distribuzione campioni dopo PCA

2.2.4 Matrice di proiezione

Per costruire la matrice di proiezione che ci permetterà di passare da uno spazio 4-dimensionale ad uno 2-dimensionale concateniamo le prime due componenti degli autovettori.

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

La matrice risultante sarà quindi:

$$W = \begin{bmatrix} 0.52237162 & -0.37231836 \\ -0.26335492 & -0.92555649 \\ 0.58125401 & -0.02109478 \\ 0.56561105 & -0.06541577 \end{bmatrix}$$

2.2.5 Proiezione nel nuovo spazio

Come ultimo passo, utilizzeremo la matrice W per trasformare i nostri campioni nel nuovo sottospazio con l'equazione

$$Y = X \times W \quad Y \in \mathcal{M}^{150 \times 2}$$

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

Dopo l'applicazione della PCA otteniamo uno spazio bidimensionale dove i campioni sono distribuiti lungo i nuovi assi (Figura 8).

Esiste anche una funzione di libreria che calcola direttamente dal dataset la PCA con il numero di componenti scelto.

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

3 Caso di studio

Etiam euismod. Fusce facilisis lacinia dui. Suspendisse potenti. In mi erat, cursus id, nonummy sed, ullamcorper eget, sapien. Praesent pretium, magna in eleifend egestas, pede pede pretium lorem, quis consectetur tortor sapien facilisis magna. Mauris quis magna varius nulla scelerisque imperdiet. Aliquam non quam. Aliquam porttitor quam a lacus. Praesent vel arcu ut tortor cursus volutpat. In vitae pede quis diam bibendum placerat. Fusce elementum convallis neque. Sed dolor orci, scelerisque ac, dapibus nec, ultricies ut, mi. Duis nec dui quis leo sagittis commodo.

Aliquam lectus. Vivamus leo. Quisque ornare tellus ullamcorper nulla. Mauris porttitor pharetra tortor. Sed fringilla justo sed mauris. Mauris tellus. Sed non leo. Nullam elementum, magna in cursus sodales, augue est scelerisque sapien, venenatis congue nulla arcu et pede. Ut suscipit enim vel sapien. Donec congue. Maecenas urna mi, suscipit in, placerat ut, vestibulum ut, massa. Fusce ultrices nulla et nisl.

4 Codice Python completo

```
'''
Created on 08 feb 2018

@author: marco
'''

import pandas as pd
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.decomposition import PCA as sklearnPCA

def separate():
    print('\n#####\n')

# 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
separate()

# print(df)

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

# print(X)
# print(y)

# 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()

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

```

# 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()

# 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()

# 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)
print('Autovalori ordinati:')
for i in eig_pairs:
    print(i[0])
separate()

# 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()

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

```

```

print('Matrice W:\n', matrix_w)
separate()

# proiezione nel nuovo spazio
Y = X_std.dot(matrix_w)
print(Y)
with plt.style.context('seaborn-whitegrid'):
    plt.figure(figsize=(6, 4))
    for lab, col in zip(('Iris-setosa', 'Iris-versicolor', 'Iris-virginica'),
                        ('blue', 'red', 'green')):
        plt.scatter(Y[y==lab, 0],
                    Y[y==lab, 1],
                    label=lab,
                    c=col)

    plt.xlabel('Componente Principale 1')
    plt.ylabel('Componente Principale 2')
    plt.legend(loc='lower center')
    plt.tight_layout()
    plt.show()

# pacchetto scikit-learn
sklearn_pca = sklearnPCA(n_components=2)
Y_sklearn = sklearn_pca.fit_transform(X_std)
print(Y_sklearn)
for i in Y_sklearn:
    i[1] = -1*i[1]
print(Y_sklearn)
with plt.style.context('seaborn-whitegrid'):
    plt.figure(figsize=(6, 4))
    for lab, col in zip(('Iris-setosa', 'Iris-versicolor', 'Iris-virginica'),
                        ('blue', 'red', 'green')):
        plt.scatter(Y_sklearn[y==lab, 0],
                    Y_sklearn[y==lab, 1],
                    label=lab,
                    c=col)

    plt.xlabel('Componente Principale 1')
    plt.ylabel('Componente Principale 2')
    plt.legend(loc='lower center')
    plt.tight_layout()
    plt.show()

if __name__ == '__main__':
    pass

```

Riferimenti bibliografici

[Figueredo and Wolf, 2009] Figueredo, A. J. and Wolf, P. S. A. (2009). Assortative pairing and life history strategy - a cross-cultural study. *Human Nature*, 20:317–330.