תרגול 9 : PCA

פתרון

שאלה 1:

א) נבדוק תחילה כי הממוצע החדש אפס:

$$\tilde{\mu}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}Mx_k = M\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_k\right)$$
$$= M\cdot 0 = 0$$

השונות האמפירית, נתונה ע"י:

$$\tilde{\Sigma}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k\tilde{x}_k^T = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}Mx_kx_k^TM^T$$
$$= M\hat{\Sigma}_nM^T$$

כאשר $\hat{\Sigma}_n$ היא השונות האמפירית המקורית, ונסמן כי:

$$V\cdot V^T = I \quad , \quad \hat{\Sigma}_n = VDV^T \quad , \quad D = \begin{pmatrix}\lambda_1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_d\end{pmatrix}$$

את הפירוק של $\tilde{\Sigma}_n$ נקבל, אז:

$$\tilde{\Sigma}_n = (MV)D(MV)^T$$

נשים לב, כי זהו פרוק, אבל אינו בהכרח פירוק ספקטרלי, כי $MV\in\mathbb{R}^{s\times d}$. אבל, :

$$MV = \begin{pmatrix}Mv_1 & \dots & Mv_d\end{pmatrix}$$

כאשר $\{v_i\}_{i=1}^{d}$ הם ו"ע של Σ_n (העמודות של V). לכן:

$$(Mv_i)^T(Mv_j) = v_i^TM^TMv_j = v_i^Tv_j = 1\{i=j\} \quad \forall i,j=1,\dots,d$$

כלומר העמודות $\{u_i = Mv_i\}_{i=1}^{d}$ הן אורתונורמליות. נשלים אותן ע"י וקטורים $\{u_i\}_{i=d+1}^{s}$ לבסיס אורתונורמלי ל-$\mathbb{R}^s$, ונקבל

$$U = (u_1,\dots,u_d,u_{d+1},\dots,u_s)\in\mathbb{R}^{s\times s}$$

נקבל: $U^TU = I$.

פתר: (2)

$$\Sigma_u = (MV)D(MV)^T$$

$$= U \cdot \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \lambda_d & & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \ 0 \end{pmatrix} U^T$$

מכיוון ש-Σ_u מטריצה סימטרית, זהו הפירוק שלה לע"ע.
מכאן שהכיוונים העיקריים של $\{\tilde{x}_k\}$ נתונים ע"י:

$$\begin{cases} u_i = M v_i & 1 \le i \le d \\ u_i & d+1 \le i \le s \end{cases}$$

כך ש $u_i \perp u_j$ לכל $1 \le i,j \le s$.

ב. אם $d \le m$ אז:

$$\tilde{z}_k = \tilde{A}\tilde{x}_k = \begin{pmatrix} (Mv_1)^T \\ \vdots \\ (Mv_m)^T \end{pmatrix} M x_k$$

$$= \begin{pmatrix} v_1^T M^T M x_k \\ \vdots \\ v_m^T M^T M x_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_m^T \end{pmatrix} x_k$$

$$= A x_k = z_k$$

כלומר הרכיבים העיקריים של $\{\tilde{x}_k\}$ נהיים זהים לאלו של $\{x_k\}$ המקוריים.
אם $d < m$, הרכיבים שמתווספים הם מהצורה:

$$\tilde{z}_k = \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_d^T \\ u_{d+1}^T M \\ \vdots \\ u_m^T M \end{pmatrix} x_k$$

השלכה לבעיית הסיווג:
המטריצה M מייצגת טרנספורמציה לינארית של תמונות לממד גבוה יותר s. המסקנה היא כי אם הטרנספורמציה אורתוגונלית (במובן $M^TM=I$), אז d הרכיבים

העיקריים של התמונות המותמרות יהיו זהים לאלו של האוסף המקורי. לכן, אם רוצים לבצע סינון על סמך הכיוונים העיקריים ולשמר אותו לגבי האוסף המקורי, יש לקחת b כמו רכיבים עיקריים (אחרי הסינון יהיו זהים לאלו של האוסף המקורי).

בספר, אם $b=s$, ראינו בכיתה כי PCA אינו רגיש להתקפה אורתוגונלית כמו סיבוב, הזזה ושיקוף.

כמובן שאם $M^TM \neq I$, הנ"ל אינו נכון, וניתן לקבל רכיבים עיקריים שונים...

ב. מרכזיות, התוחלת האמפירית:

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k = M\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_k\right) + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\varepsilon_k = 0$$

השונות האמפירית:

$$\tilde{\Sigma}_u = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\tilde{x}_k\tilde{x}_k^T = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}Mx_kx_k^TM^T + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}Mx_k\varepsilon_k^T + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\varepsilon_kx_k^TM^T + \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\varepsilon_k\varepsilon_k^T$$

$$= M\hat{\Sigma}_uM^T + \lambda I$$

$$= (MV)D(MV)^T + (MV)\lambda I(MV)^T$$

$$= (MV)(D+\lambda I)(MV)^T$$

קיבלנו פירוק של Σ_n (כי $(MV)^T(MV)=I$, ו-$D+\lambda I$ אלכסוני).

נשים לב כי כל מה שהשתנה הוא ערך קבוע, ולכן אין שינוי בסדר שלהם, ולכן גם אין שינוי בסדר של הכיוונים העיקריים. אשר נתונים (כמו קודם) ע"י: $\{Mv_i\}_{i=1}^{b}$. וכן כמו קודם:

$\tilde{z}_k = z_k$, $1 \le k \le n$.

מסקנה: PCA לא רגיש לרעש מהסוג הזה.

שאלה 2:

א.

$$\hat{\Sigma}_4 = \frac{1}{4}\left(\begin{pmatrix}-1\\2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & -2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1\\-2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -2\end{pmatrix} \right)$$

$$= \frac{1}{4}\left(\begin{pmatrix}1 & -2\\-2 & 4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1 & 2\\2 & 4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1 & 2\\2 & 4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1 & -2\\-2 & 4\end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 4\end{pmatrix} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc}\text{ציר } x & \text{ציר } y\end{array} \\ \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} \end{array} \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$$

ברור כי זהו גם פירוק לע"ע ו־ו"ע, כי הע"ע הגדול ביותר מתאים לציר y, ולכן זהו גם הכיוון העיקרי הראשון.

ב. אם מטילים את הדוגמאות על ציר y, מקבלים הפרדה מושלמת, למשל ע"י נקודת הפרדה $\boxed{y^* = 0}$

מסקנה, כי במקרה זה ה-PCA שמר על כושר הפרדה לינארי.

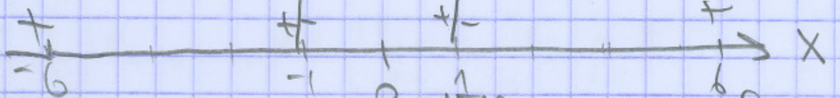
ג. במקרה זה:

$$\hat{\Sigma}_6 = \frac{1}{6}\left(\begin{pmatrix}4 & 0\\0 & 16\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}6\\2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}6 & 2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}-6\\2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-6 & 2\end{pmatrix} \right)$$

$$= \frac{1}{6}\left(\begin{pmatrix}4 & 0\\0 & 16\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}36 & 12\\12 & 4\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}36 & -12\\-12 & 4\end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix}12.7 & 0\\0 & 4\end{pmatrix}$$

כלומר, הכיוון העיקרי הראשון הוא ציר x ומקבלים:



כי לא ניתן להפריד בכלל!

השפעת scaling:

נניח שהענן המקורי, מיושר — קורלציה אלכסונית:

$$\hat{\Sigma}_n = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \qquad x_k \in \mathbb{R}^2,\ \{x_k\}_{k=1}^n$$

נניח כי התבנית עברה scaling ע״י מטריצה אלכסונית

$$M = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$$

$$\tilde{x}_k = M x_k.$$

אזי

$$\tilde{\Sigma}_n = M \hat{\Sigma}_n M^T = \begin{pmatrix} a^2\lambda_1 & 0 \\ 0 & b^2\lambda_2 \end{pmatrix}$$

תרגיל 1

כלומר scaling לא מזיז כלל כיוונם של הכיוונים העיקריים...

הערה: אפשר לעבור ל $\mathbb{R}^d$ ע״י:

$$\left.\begin{aligned} \hat{\Sigma}_n &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_d \end{pmatrix} \\ M &= \begin{pmatrix} m_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & m_d \end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \tilde{\Sigma}_n = \begin{pmatrix} m_1^2\lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & m_d^2\lambda_d \end{pmatrix}$$