תרגול 12: אנליזת כיוונים עיקריים (PCA)

תקציר התאוריה

נתון אוסף ווקטורים $\left\{x_k\right\}_{k=1}^{n}$, $x_k \in \mathbb{R}^d$ בעלי מימד d גדול.

המטרה: לייצג וקטורים אלה (או את ה"מידע" הגלום בהם) על ידי וקטורים במימד נמוך יותר $m < d$.

הנחה: הממוצע $\hat{\mu}_n = (1/n)\sum_{k=1}^{n} x_k = 0$. אחרת, יש לבצע פעולה מקדימה של מרכוז: $x_k \leftarrow x_k - \hat{\mu}_n$.

נגדיר את המטריצה הבאה: $\hat{\Sigma}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k x_k^T$, השונות האמפירית של האוסף.

השונות האמפירית בכיוון ווקטור יחידה $w \in \mathbb{R}^d$ מוגדרת ע"י:

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(w^T x_k\right)^2 = w^T\left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k x_k^T\right)w = w^T \hat{\Sigma}_n w \triangleq \frac{1}{n} S_n(w).$$

<u>**כיוון עיקרי ראשון**</u> של האוסף $\left\{x_k\right\}_{k=1}^{n}$: הינו $w_1 \in \mathbb{R}^d$ המביא למקסימום את $S_n(w)$.

<u>**כיוון עיקרי ה-**</u> m של האוסף $\left\{x_k\right\}_{k=1}^{n}$: הינו $w_m \in \mathbb{R}^d$ המביא למקסימום את $S_n(w)$ מבין כל ווקטורי יחידה המאונכים ל- $w_1, \ldots, w_{m-1}$.

טענה (הוכחה בהרצאה)-חישוב הכיוונים העיקריים: $w_m = v_m$, כאשר v_m הינו וקטור עצמי של $\hat{\Sigma}_n$ המתאים לערך עצמי λ_m של $\hat{\Sigma}_n$ ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_d$).

נסכם <u>בסכמה לחישוב הכיוונים העיקריים</u>:

1. מרכזו את הדוגמאות: $x_k \leftarrow x_k - \hat{\mu}_n$

   כאשר, $\hat{\mu}_n = (1/n)\sum_{k=1}^{n} x_k$ הוא הממוצע האמפירי.

2. חשבו את מטריצת השונות האמפירית: $\hat{\Sigma}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_k x_k^T$.

3. חשבו את הוקטורים העצמיים והערכים העצמיים של מטריצת השונות.

   ניתן לבצע זאת בצורה מטריציונית ע״י Eigen-decomposition של מטריצת השונות (נשים לב כי מטריצת השונות היא סימטרית ולכן ניתנת לליכסון ע״י מטריצה אורתוגונלית):

$$\hat{\Sigma}_n = V\Lambda V^{-1} = V\Lambda V^T$$

   כאשר $V = \left\{v_1, v_2, ..., v_d\right\}$ מכילה את הו״ע של המטריצה, ו- Λ מטריצה אלכסונית המכילה את הע״ע של המטריצה על האלכסון.

4. בחר את m הכיוונים העיקריים להיות הווקטורים העצמאיים המתאימים ל- m הערכים העצמאיים הגדולים ביותר.

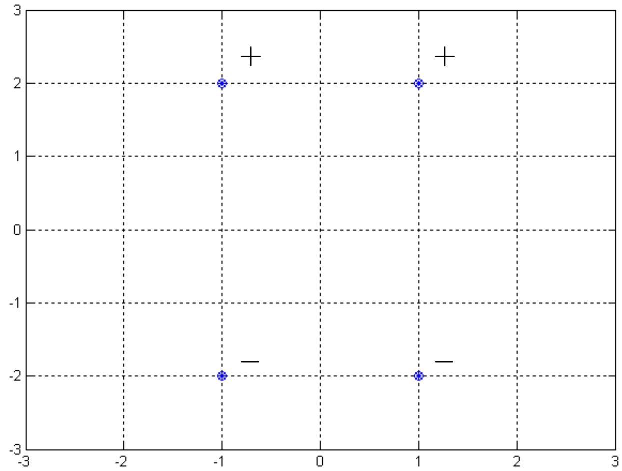
שאלות

<u>שאלה 1</u>

נתבונן בבעיית הסיווג עם מרחב כניסה $X = \mathbb{R}^2$ ומרחב הפלט $Y = \{+1, -1\}$.

נתונה סדרת לימוד $\left\{x_k, y_k\right\}_{k=1}^{4}$, כאשר:

$$\begin{array}{llll} x_1 = (-1,2)^T, & x_2 = (1,2)^T, & x_3 = (-1,-2)^T, & x_4 = (1,-2)^T \\ y_1 = +1, & y_2 = +1, & y_3 = -1, & y_4 = -1. \end{array}$$

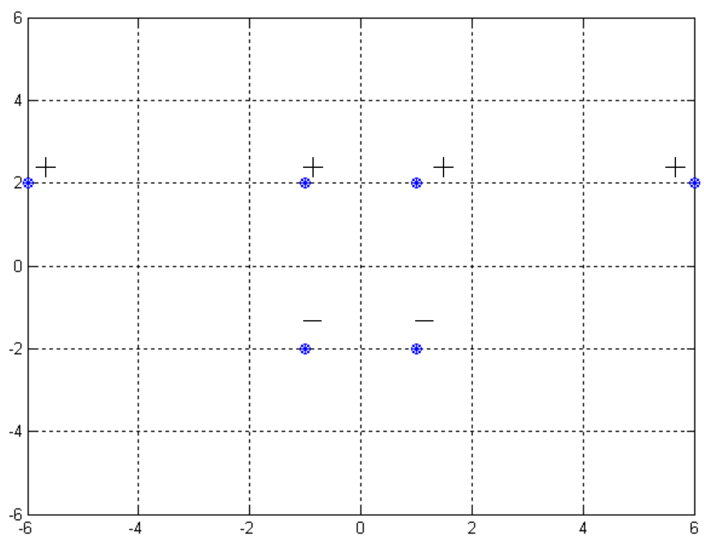


א. חשבו את השונות אמפירית $\hat{\Sigma}_4$ של אוסף התבניות הנתונות. מהו כיוון העיקרי הראשון של האוסף ?

ב. הציעו מסווג לינארי אשר מסווג ללא שגיאה את הסדרת הלימוד הנתונה על סמך ההטלה של התבניות על הכיוון העיקרי הראשון בלבד. מה מסקנתכם ?

ג. נניח כי כעת מתווספות שתי דוגמאות לימוד חדשות לסדרה :

$$x_5 = (6,2)^T, \quad x_6 = (-6,2)^T$$
$$y_5 = +1, \quad y_6 = +1.$$



ד. חשבו את השונות אמפירית $\hat{\Sigma}_6$ של אוסף התבניות הנתונות כעת. מהו כיוון העיקרי הראשון של האוסף ? הסבירו.

ה. שרטטו את ההטלה של סדרת הלימוד של הכיוון העיקרי הראשון. האם במקרה זה ניתן לסווג את סדרת הלימוד ללא שגיאה על ידי שימוש במסווג לינארי, על סמך ההטלה של התבניות על הכיוון העיקרי הראשון בלבד ?

שאלה 2

יהי $\left\{x_k\right\}_{k=1}^{n}$, $x_k \in \mathbb{R}^d$, אוסף תבניות נתון. נניח כי כל תבנית עברה טרנספורמציה לינארית ע"י מטריצה **אורתוגונאלית** $M \in \mathbb{R}^{s\times d}$, כלומר:

$$\tilde{x}_k = Mx_k \in \mathbb{R}^s, \quad k = 1,...,n$$

כאשר M מקיימת $M^T M = I$ ו- $s \geq d$.

א. מהם הכיוונים העיקריים של $\left\{\tilde{x}_k\right\}_{k=1}^{n}$?

ב. מהם הווקטורים המתקבלים ע"י הטלה של $\left\{\tilde{x}_k\right\}_{k=1}^{n}$ על m הכיוונים העיקריים ?

נניח כעת כי $s = d$ ובנוסף לטרנספורמציה, מתווסף רעש לכל תבנית:

$$\tilde{x}_k = Mx_k + \varepsilon_k \in \mathbb{R}^d, \quad k = 1,...,n$$

כאשר ידוע כי:

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\varepsilon_k = 0, \quad \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}x_k\varepsilon_k^T = 0, \quad \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\varepsilon_k\varepsilon_k^T = \lambda I$$

עבור $\lambda > 0$, ו- I מטריצת יחידה.

ג. חזרו על סעיפים א' וב' עבור מקרה זה.