pca

June 25, 2021

1 Principal Component Analysis (PCA)

Wir wollen zuerst die PCA anhand eines einfachen Beispiel mit Hilfe der Linearen Algebra "händisch" durchführen. Anschließend verwendenw wir die Klasse *PCA* aus dem Package *sklearn.decomposition*.

1.1 Eigenständige Durchführung der PCA

Wir berechnen hierzu die Eigenwerte und Eigenvektoren aus der Koeffizientenmatrix.

Definition: Ein Matrix A multipliziert mit ihrem Eigenvektor $\overrightarrow{v}$ ist gleich dem Produkt aus einem Skalar λ und dem Eigenvektor:

$A\overrightarrow{v} = \lambda\overrightarrow{v}$

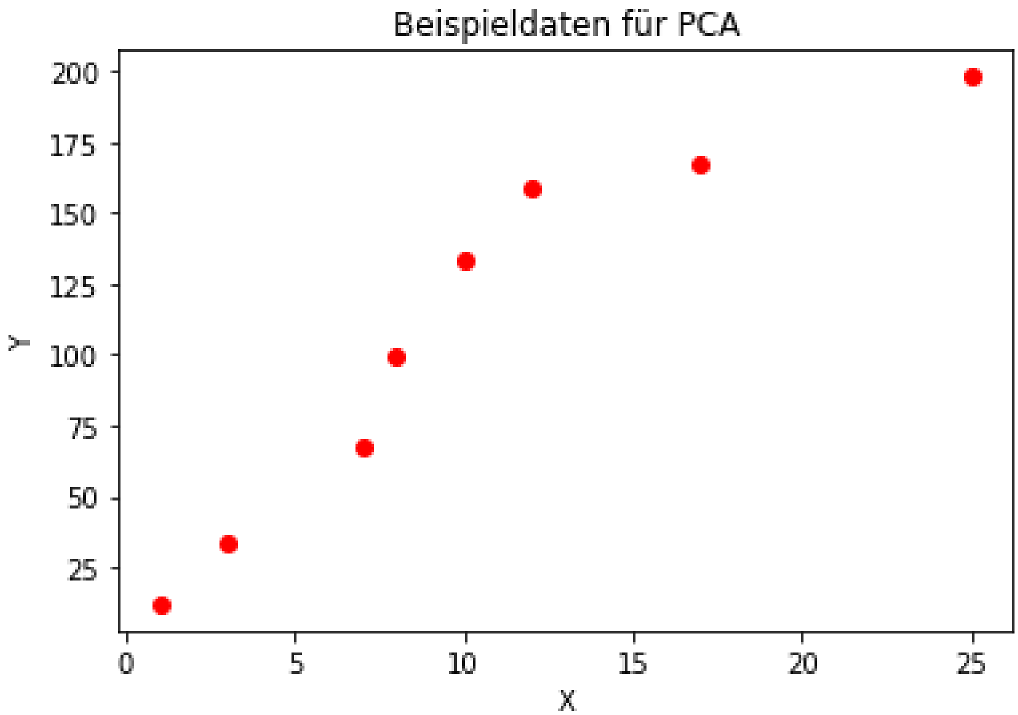
Hat unser ursprünglicher Datensatz z.B. 5 Dimensionen, so erhalten wir eine 5x5 Koeffizientenmatrix und somit 5 Eigenwerte bzw. Eigenvektoren. Da eine Koeffizientenmatrix immer symmetrisch ist, erhalten wir auch "sinnvolle" Werte (also z.B. keine imaginären Zahlen) und die Vektoren stehen auch senkrecht zueinander.

Wollen wir von n Dimensionen auf k reduzieren, verwenden wir die k Eigenvektoren der größten k Eigenwerte und multiplizieren damit unsere Daten.

Wir wollen dies anhand eines simplen Beispiels zeigen. Wir erstellen dazu zuerst einen, 2-dimensionalen Datensatz und visualisieren die Daten mit einem Scatterplot.

[1]:
```
%matplotlib inline

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt

df = pd.DataFrame({"X":[1,3,7,8,10,12,17,25],
                   "Y":[12,34,67,99,133,159,167,198]})

print(df)

plt.scatter(df.X, df.Y, color="r")
plt.title("Beispieldaten für PCA")
plt.xlabel("X")
plt.ylabel("Y")
plt.show()
```

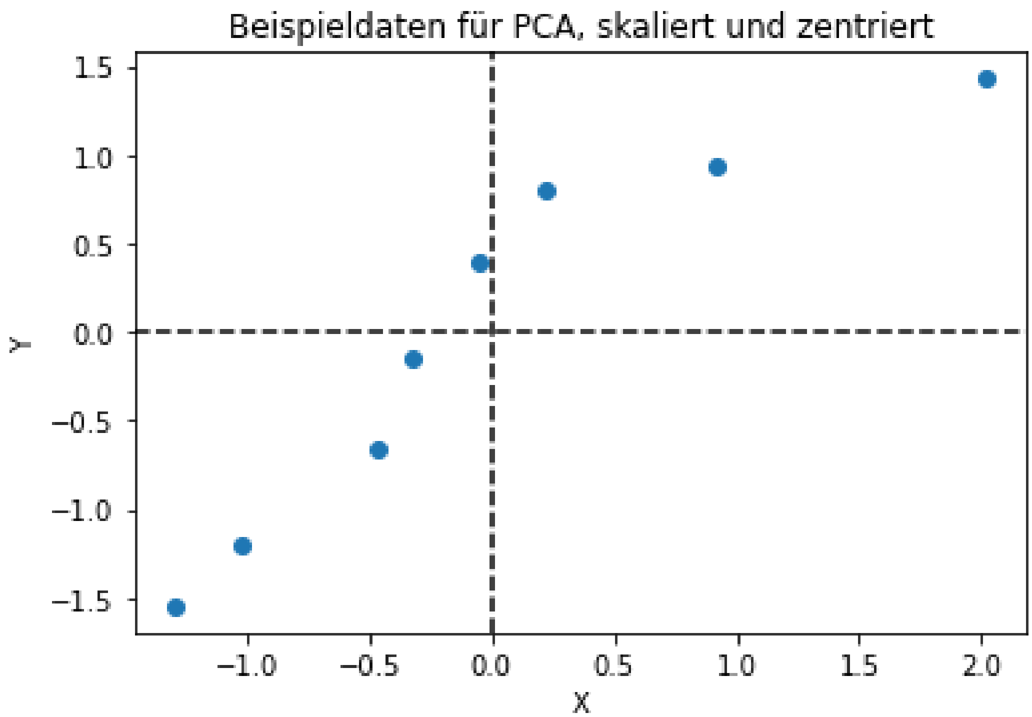
	X	Y
0	1	12
1	3	34
2	7	67
3	8	99
4	10	133
5	12	159
6	17	167
7	25	198



Nun skalieren wir die Daten und zentrieren diese. Wir subtrahieren von den X- und Y-Werten jeweils deren Mittelwerte.

[2]:
```
%matplotlib inline

from sklearn.preprocessing import StandardScaler

df_scaled = pd.DataFrame(StandardScaler().fit_transform(df[["X", "Y"]]), columns=df.columns)
x_mean = df_scaled.X.mean()
y_mean = df_scaled.Y.mean()

df_centered = pd.DataFrame({"X": df_scaled.X-x_mean, "Y": df_scaled.Y - y_mean}, columns = df.columns)
```

```
plt.scatter(df_centered.X, df_centered.Y)
plt.axvline(x=0, color='k', linestyle='--')
plt.axhline(y=0, color='k', linestyle='--')
plt.title("Beispieldaten für PCA, skaliert und zentriert")
plt.xlabel("X")
plt.ylabel("Y")
plt.show()
```



Nun berechnen wir die Kovarianz-Matrix sowie die Eigenwerte (eigw) und Eigenvektoren (eigv).

[3]:
```
import numpy as np

kovmatr = pd.DataFrame.cov(df_centered)
print("Kovarianzmatrix:\n")
print(kovmatr)
print()

# Berechne Eigenwerte und Eigenvektoren
eigw, eigv = np.linalg.eig(kovmatr)

print(f"Eigenwerte: {eigw},\nEigenvektoren:\n {eigv}")
```

```
Kovarianzmatrix:
```

```
          X         Y
X  1.142857  1.068206
Y  1.068206  1.142857

Eigenwerte: [2.2110636  0.07465068],
Eigenvektoren:
 [[ 0.70710678 -0.70710678]
 [ 0.70710678  0.70710678]]
```

Wir multiplizieren unsere zenrierten Daten mit dem Eigenvektor:

[4]:
```
df_1dim1 = df_centered @ eigv[1]
print(df_1dim1)
```

```
0   -2.008092
1   -1.564013
2   -0.800289
3   -0.340691
4    0.239135
5    0.728464
6    1.306985
7    2.438502
dtype: float64
```

1.2 Vergleich mit Klasse PCA

Wir verwenden nun die Klasse *PCA* aus dem Package *sklearn.decomposition*. Als Daten übergeben wir die skalierten Daten. Eine Zentrierung erledigt die *fit*-Methode für uns.

[5]:
```
from sklearn.decomposition import PCA

pca = PCA(n_components=1)
pca.fit(df_scaled)
print(f"Eigenvektor: {pca.components_}")
print(f"Eigenwert: {pca.explained_variance_}")
print("Tranformierte Daten: \n")
df_1dim2 = pca.transform(df_scaled)
print(df_1dim2)
```

```
Eigenvektor: [[0.70710678 0.70710678]]
Eigenwert: [2.2110636]
Tranformierte Daten:

[[-2.00809186]
 [-1.56401257]
 [-0.80028909]
 [-0.34069149]
 [ 0.2391352 ]
 [ 0.72846363]
```

```
[ 1.30698456]
 [ 2.43850161]]
```

1.3 Beispiel: PCA mit IRIS

Wir erstellen ein Modell Random Forest (Klassifikation), um die IRIS-Spezies vorherzusagen. Zuerst mit allen 4 Features, danach mit Hilfe von PCA auf 2 Features reduziert. Wir berechnen jeweils die Accuracy.

[6]:
```
from sklearn.datasets import load_iris
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.model_selection import train_test_split

data = load_iris()

X = StandardScaler().fit_transform(data.data)
y = data.target

X_train, X_test, y_train, y_test =␣
 ↪train_test_split(X,y,shuffle=True,test_size=0.3, random_state=23)
```

[7]:
```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier

forest1 = RandomForestClassifier(n_estimators=50).fit(X_train, y_train)
print(forest1.score(X_test, y_test))
```

```
0.9777777777777777
```

Wir reduzieren mit PCA auf nur 2 Features:

[8]:
```
pca = PCA(n_components=2)

X_train_pca = pca.fit_transform(X_train)
X_test_pca = pca.fit_transform(X_test)

forest2 = RandomForestClassifier(n_estimators=100).fit(X_train_pca, y_train)
print(forest2.score(X_test_pca, y_test))
```

```
0.8888888888888888
```

Wir reduzieren auf nur 2 Features:

Diese 2 Dimensionen können wir nun auch ganz einfach plotten:

[9]:
```
%matplotlib inline
classes = ["Setosa", "Versicolor", "Virginica"]

for i in range(3):
    data = X_train_pca[y_train==i]
    plt.scatter(data[:,0], data[:,1], label=classes[i])
```

```
plt.legend()
plt.show()
```