Principal Component Analysis

Andrej Lúčny

Katedra aplikovanej informatiky FMFI UK

lucny@fmph.uniba.sk

http://www.fmph.uniba.sk/~lucny

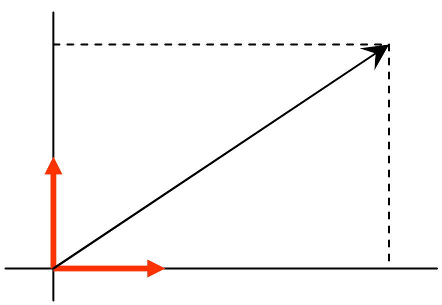
Vektor

- stĺpcový $X = \begin{bmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix}$
- riadkový $X = [X_1, X_2, \ldots X_n]$
- transpozícia

```
octave> A =  [ 1; 2 ; 3; 4; 5]
A =

  1
  2
  3
  4
  5

octave> B = [ 1 2 3 4 5 ]
B =

  1   2   3   4   5

octave> A’
ans =

 1   2   3   4   5

octave> B * B’
octave> B’ * B
```

Báza

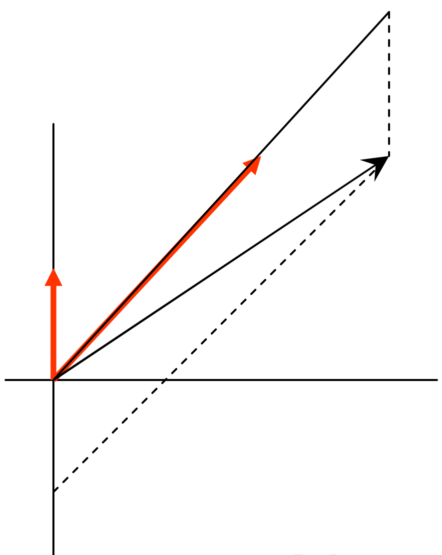
- Každý vektor alebo bod je vyjadrený na základe určitej bázy, ako súčet násobkov (lineárna kombinácia) bázových vektorov
- Normálne používame ako bázu jednotkové vektory



```
octave> C = [ 1 0 ] .* 3 +  [ 0 1 ] .* 2
C =

  3   2
```

Báza

- Môžeme však použiť aj inú bázu



```
octave> D = [ 2 2 ] .* 1.5 + [ 0 1 ] .* -1
D =

   3   2
```

Napr. [1.5,-1] v báze [2,2] [0,1] je to isté
ako [3,2] v báze [1,0] [0,1]

Zmena bázy

- matica prechodu:
  obrazy jednotkových vektorov
  (zobrazenie na vhodné lineárne kombinácie)

$$\left(x_1, x_2\right) \quad * \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad = \quad \left(x_1^{'}, x_2^{'}\right)$$

znamená, že

$$\begin{aligned} x_1^{'} &= a_{11}x_1 + a_{21}x_2 \\ x_2^{'} &= a_{12}x_1 + a_{22}x_2 \end{aligned}$$

$[x_1, x_2]$ v báze $[a_{11}, a_{12}]$ $[a_{21}, a_{22}]$ je to isté ako
$[x_1^{'}, x_2^{'}]$ v báze [1,0] [0,1]

Zmena bázy

- matica prechodu:
  obrazy jednotkových vektorov
  (zobrazenie na vhodné lineárne kombinácie)
  príklad:

$$(1.5, -1) \quad * \quad \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad = \quad (3,2)$$

alt.: $$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad * \quad \begin{pmatrix} 1.5 \\ -1 \end{pmatrix} \quad = \quad \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Napr. [1.5,-1] v báze [2,2] [0,1] je to isté ako [3,2] v báze [1,0] [0,1]

```
octave> A=[2 2; 0 1]
A =

  2   2
  0   1

octave> B=[1.5 -1]
B =

  1.5000  -1.0000

octave> C = B*A
C =

  3   2

octave> C = A‘ * B'
C =

  3
  2
```

Inverzná matica

- K regulárnej matici (pri prechode neznižuje dimenziu = obrazy jednotkových vektorov nie sú lineárne závislé), existuje inverzná

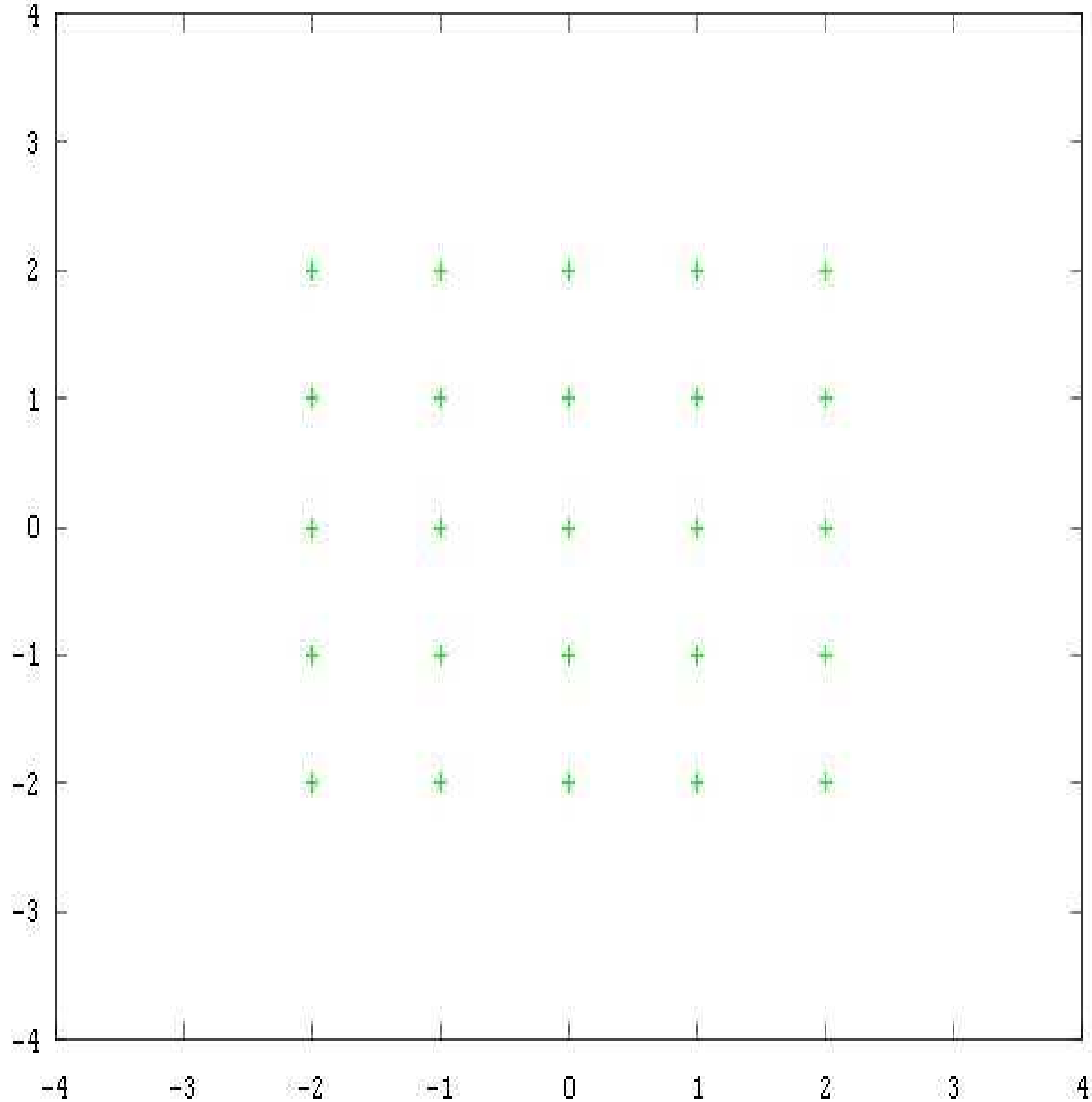
```
octave> C*inv(A)
ans =

  1.5000  -1.0000

octave> inv(A)*A
ans =

  1   0
  0   1
```

$$A\ A^{-1} = I$$

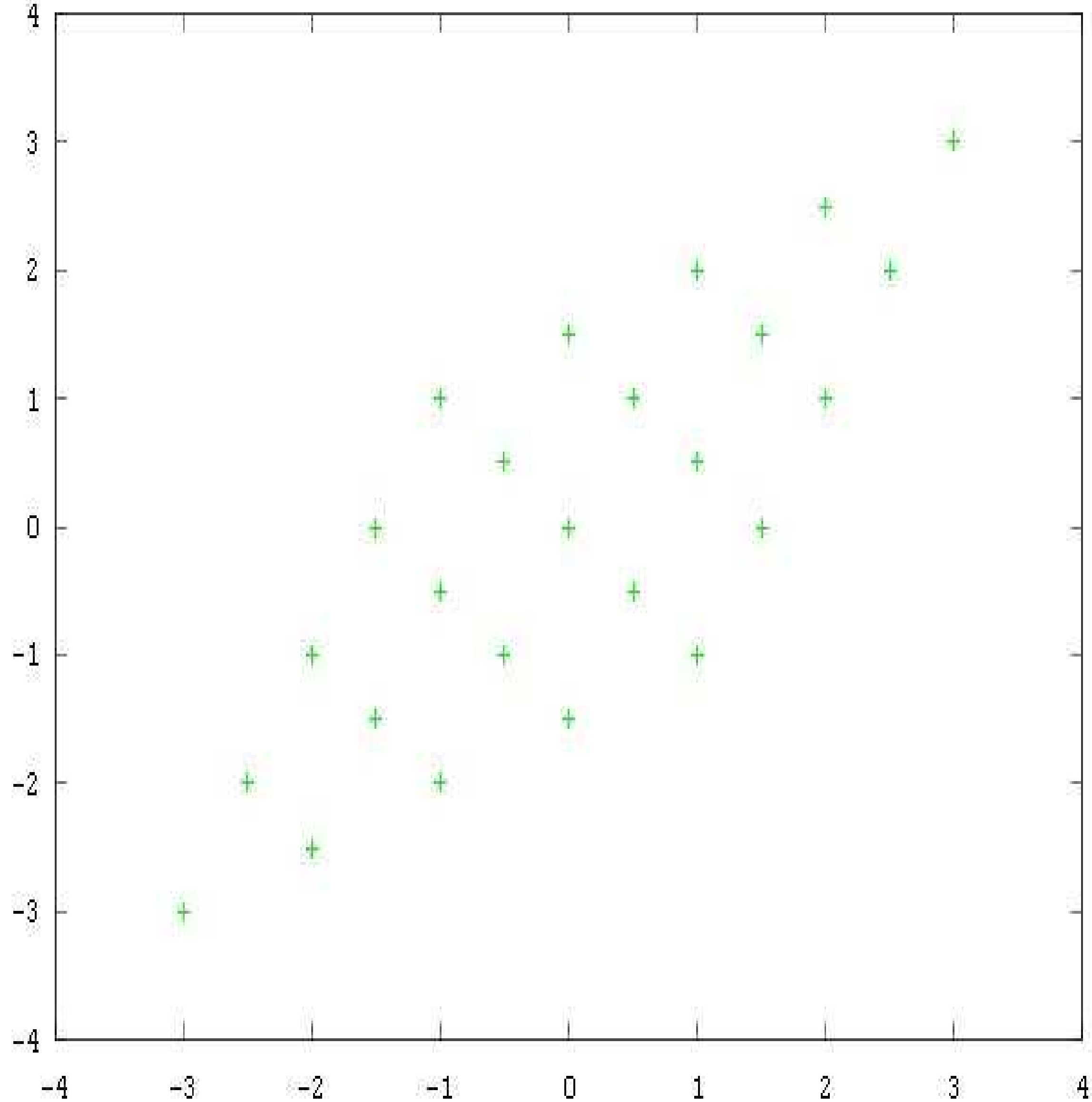
Vlastné vektory a hodnoty

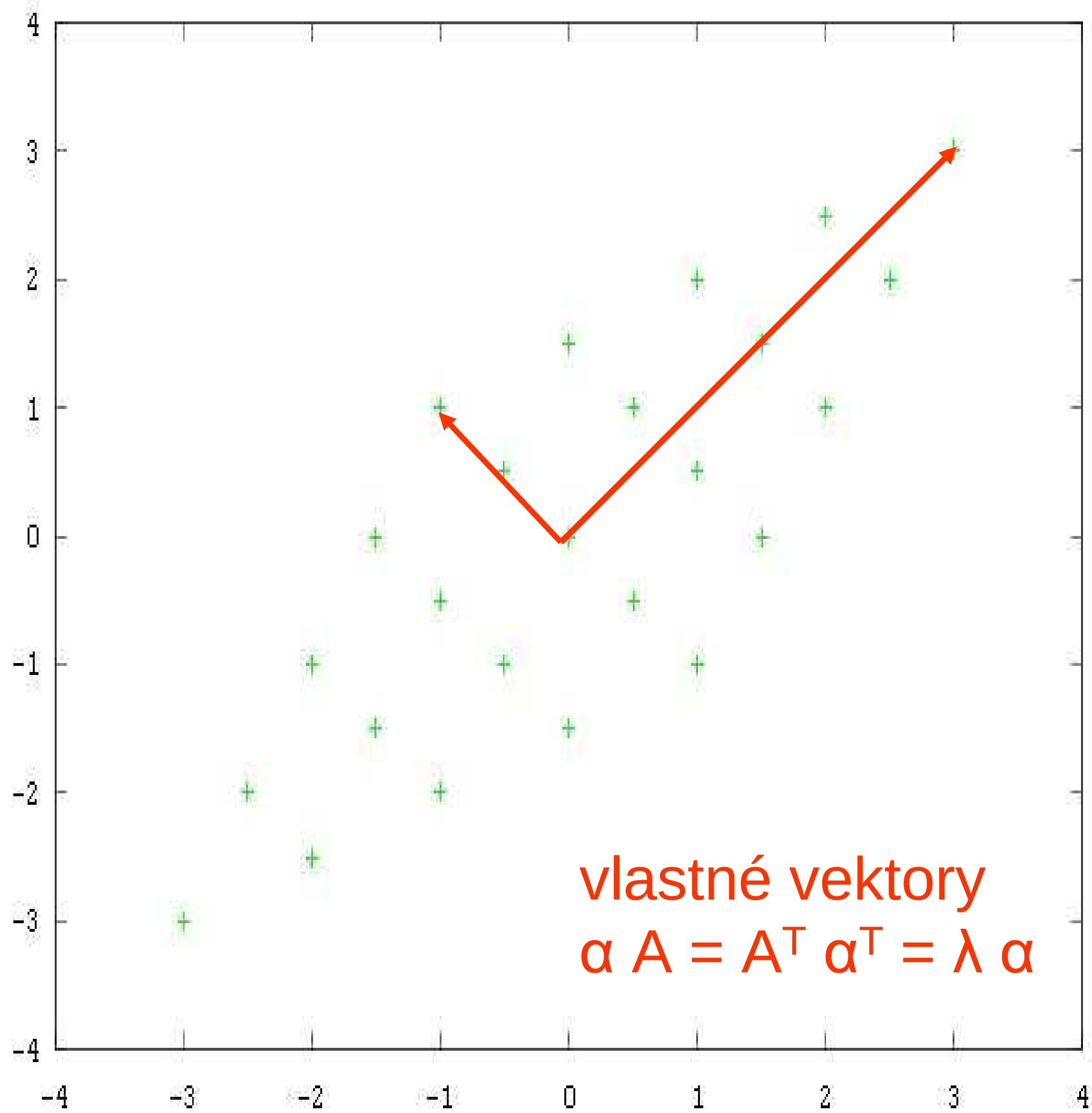
- uvažujme zmenu bázy, ktorá zachováva dimenziu

```
octave> P=[]
P = [](0x0)
octave> for i=-2:2
> for j=-2:2
> P=[P; i j];
> end
> end
octave> P
P=
  -2 -2
  -2 -1
  -2  0
...
   2  0
   2  1
   2  2

octave> plot(P(:,1),P(:,2),'g+');
octave> axis([-4 4 -4 4]);
octave> A=[1 0.5; 0.5 1]
A =

   1.00000   0.50000
   0.50000   1.00000

octave> Q=P*A
octave> plot(Q(:,1),Q(:,2),'g+');
```



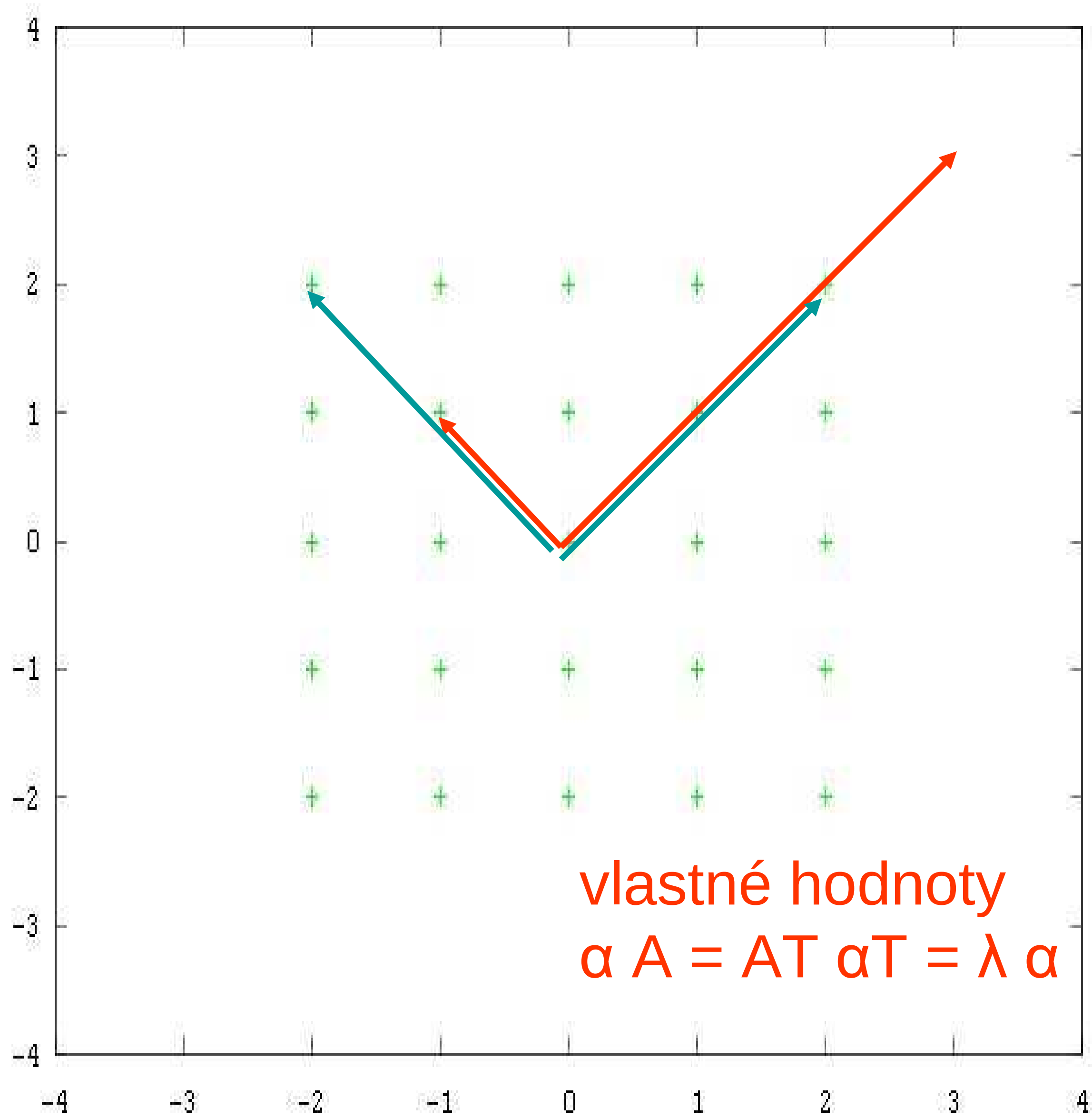
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-4 -3 -2 -1 0 1 2 3 4


4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4



vlastné vektory udávajú v akých smeroch sa vzor deformuje na obraz

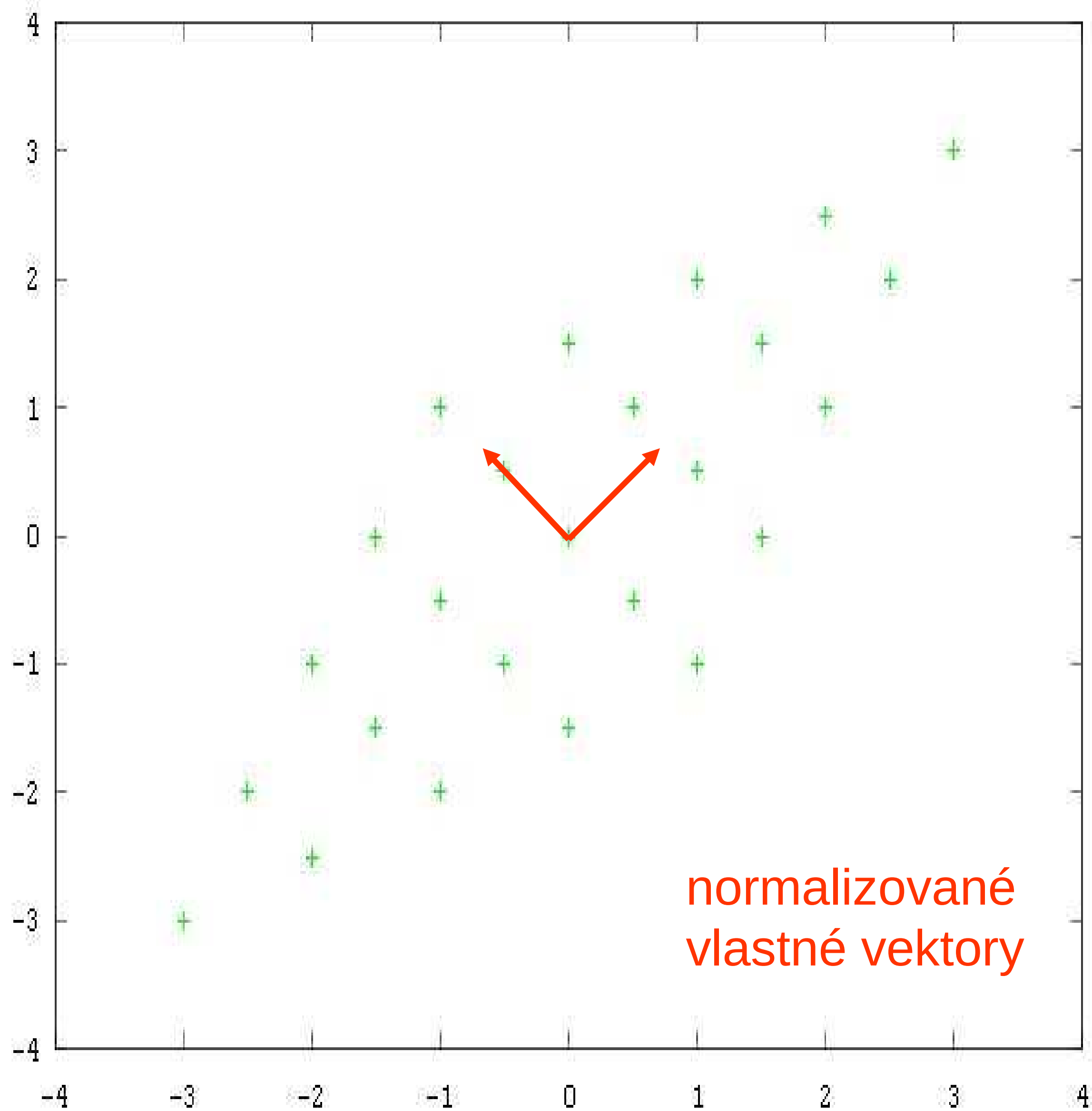
$\frac{|\leftarrow|}{|\leftarrow|} = 1/2$



$\frac{|\leftarrow|}{|\leftarrow|} = 3/2$

vlastné hodnoty udávajú zväčšovanie či zmenšovanie v deformačných smeroch

$|\leftarrow| = 1$



každý násobok vlastného vektoru je rovnako vhodný ale iba jeden má dĺžku 1

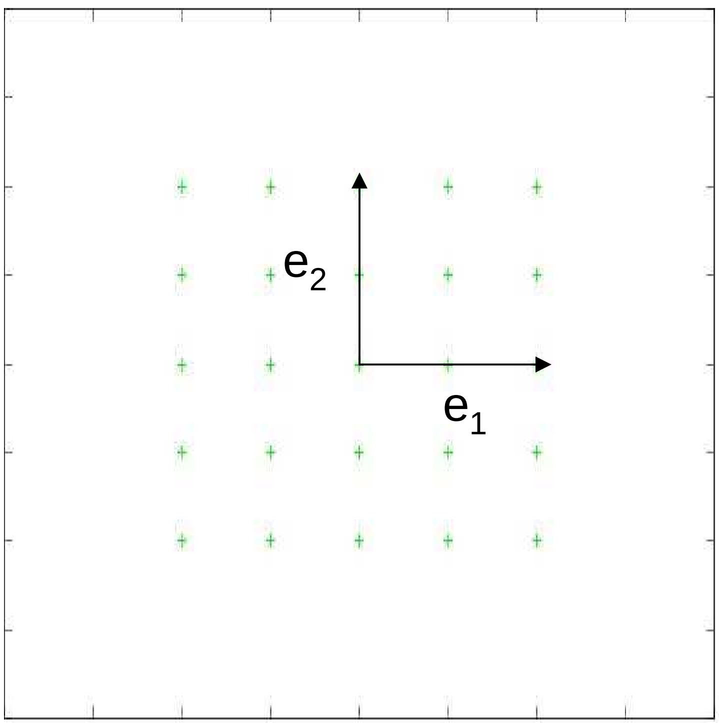
Vlastné vektory a hodnoty

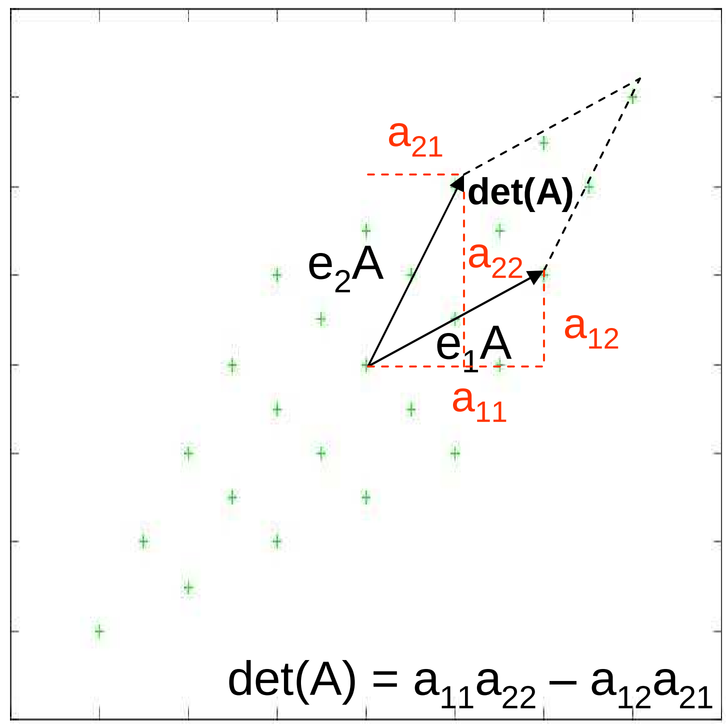
- Existuje efektívny spôsob ako vypočítať vlastné vektory a matice
- Najprv sa spočítajú vlastné hodnoty
- Podľa každej jednej z nich (niekedy môžu byť niektoré viacnásobné – ako napr. pri identite) príslušné vlastné vektory

```
octave> [V,L] = eig(A)
V =
 -0.70711   0.70711
  0.70711   0.70711
L =
  0.50000   0.00000
  0.00000   1.50000

octave> V(:,1)'
ans =
 -0.70711   0.70711

octave> V(:,1)'*A/L(1,1)
ans =
 -0.70711   0.70711

octave> V(:,2)'
ans =
  0.70711   0.70711

octave> V(:,2)'*A/L(2,2)
ans =
  0.70711   0.70711

octave> [-1 1]*A/L(1,1)
ans =
 -1   1
```

Len pre záujemcov

- Výpočet vlastných hodnôt sa opiera o pojem determinantu matice, čo je plocha (objem a ďalšie ich analógie v n dimenziách), ktorú zvierajú obrazy jednotkových vektorov





Len pre záujemcov

- determinant možno spočítať:

$$\det(A) = \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^{n} A_{i,\sigma(i)}$$

kde S_n sú permutácie n prvkov

- napr. pre $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ je $\det(A) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$
- determinant možno spočítať efektívne (Laplaceov rozvoj)
- determinant je nulový ak sú obrazy jednotkových vektorov lineárne závislé a teda matica pri zobrazení znižuje dimenziu

```
octave> A
A =
   1.00000   0.50000
   0.50000   1.00000
octave> B = [1 1; 2 2]
B =
   1   1
   2   2
```

```
octave> T=P*A
octave> plot(T(:,1),T(:,2),'v+');

octave> T=P*B
octave> plot(T(:,1),T(:,2),'v+');
```

```
octave> det(A)
ans =  0.75000

octave> det(B)
ans = 0
```

Len pre záujemcov

- Vlastné hodnoty potom počítame na základe úvahy:

  ak $\alpha A = \lambda \alpha$ je práve vtedy keď $\alpha (A - \lambda I) = \bar{0}$

  takže $(A - \lambda I)$ nesmie byť regulárna (inak $\alpha = \bar{0}$)

  takže $\det(A - \lambda I) = \bar{0}$

  tento determinant je polynóm premennej λ stupňa rozmeru A

  v komplexných číslach má teda toľko koreňov koľko je rozmer A a to sú vlastné hodnoty

- Vlastné vektory potom spočítame dosadením jednotlivých vlastných hodnôt λ do $(A - \lambda I)$ čo už je konkrétna matica a hľadáme riešenia sústavy lineárnych rovníc $(A - \lambda I)^T \alpha^T = \bar{0}$ (Gaussova eliminácia)

  tieto riešenia sú potom vlastnými vektormi

Len pre záujemcov

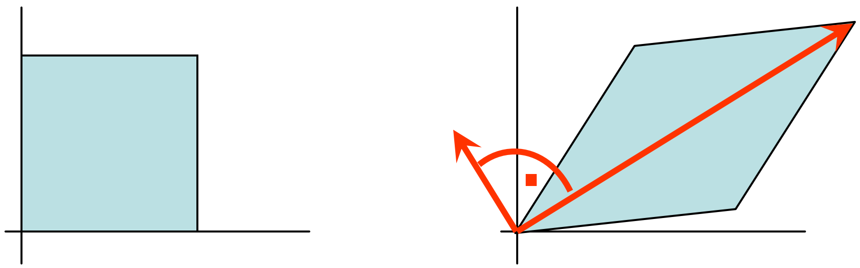
```
octave> A
A =

   1.00000   0.50000
   0.50000   1.00000

octave> chiA=[1 -2 0.75];
octave> roots(chiA)
ans =

   1.50000
   0.50000

octave> polyval(chiA,1.5)
ans = 0.0
octave> polyval(chiA,0.5)
ans = 0.0
```

```
octave> eye(2)
ans =

   1   0
   0   1

octave> A - 1.5 .* eye(2)
ans =

  -0.50000   0.50000
   0.50000  -0.50000

octave> A - 0.5 .* eye(2)
ans =

   0.50000   0.50000
   0.50000   0.50000
```

```
octave> [V,L]=eig(A)
V =
  -0.70711   0.70711
   0.70711   0.70711
L =
   0.50000   0.00000
   0.00000   1.50000

octave> (A - 1.5 .* eye(2))'*V(:,2)
ans =

   0
   0

octave> (A - 0.5 .* eye(2))'*V(:,1)
ans =

   0
   0
```

Symetrická matica

- $A = A^T$
- zmena bázy má vždy charakter kosoštvorcovej deformácie s otočením a s prevrátením alebo bez:



- vlastné hodnoty sú reálne čísla (A je Hermitovská)

  a vlastné vektory sú na seba kolmé (uhlopriečky kosoštvorca sú na seba kolmé) a preto pre $\alpha = V^T$ $\alpha\alpha^T = \mathrm{diag}$ takže ak vlastné vektory znormalizujeme, tak $\alpha\alpha^T = I$ a teda $\alpha^T = \alpha^{-1}$

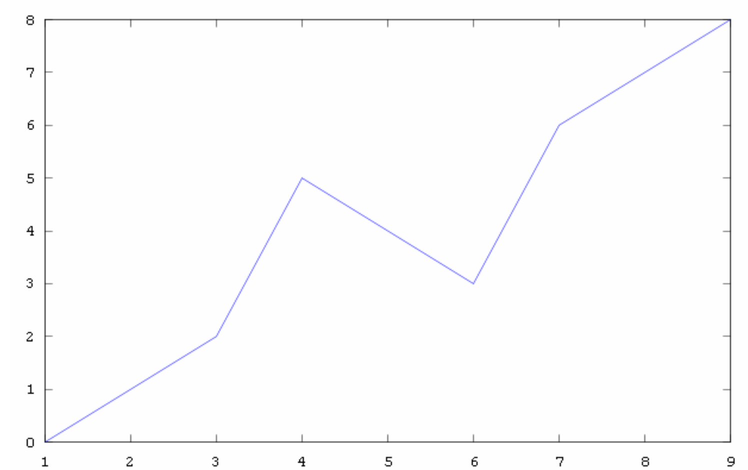
Symetrická matica

```
octave> V
V =

  -0.70711   0.70711
   0.70711   0.70711

octave> V*V'
ans =

   1.00000   0.00000
   0.00000   1.00000

octave> inv(V)
ans =

  -0.70711   0.70711
   0.70711   0.70711

octave> V'
ans =

  -0.70711   0.70711
   0.70711   0.70711
```

Štatistické spracovanie signálu

Signál: $X = \begin{bmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix}$

```
octave> A=[0;1;2;5;4;3;6;7;8]
A =
  0
  1
  2
  5
  4
  3
  6
  7
  8
octave> plot(A)
```



Základné štatistické spracovanie signálu prebieha na základe ignorovania poradia vzoriek signálu, avšak na základe sledovania vzťahov medzi rôznymi hodnotami nameranými v rovnakom čase

Priemer (očakávanie)

v našom prípade:

$$E(X) = \mu_X = \mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

Príklad: pre súčet hodu dvoch kociek je priemer 7

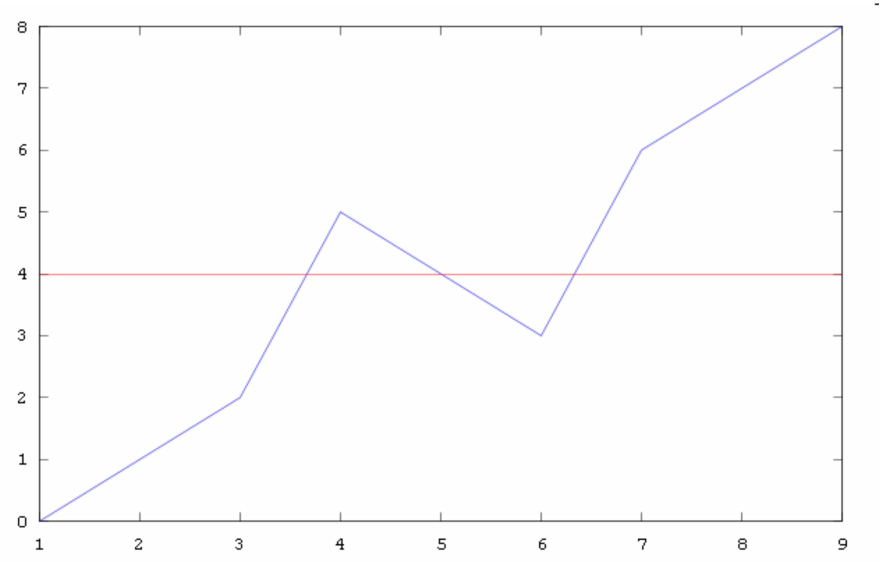
$$E(X - E(X)) = 0 \qquad E(X - \mu) = 0$$

X sú centrované, ak $E(X) = 0$

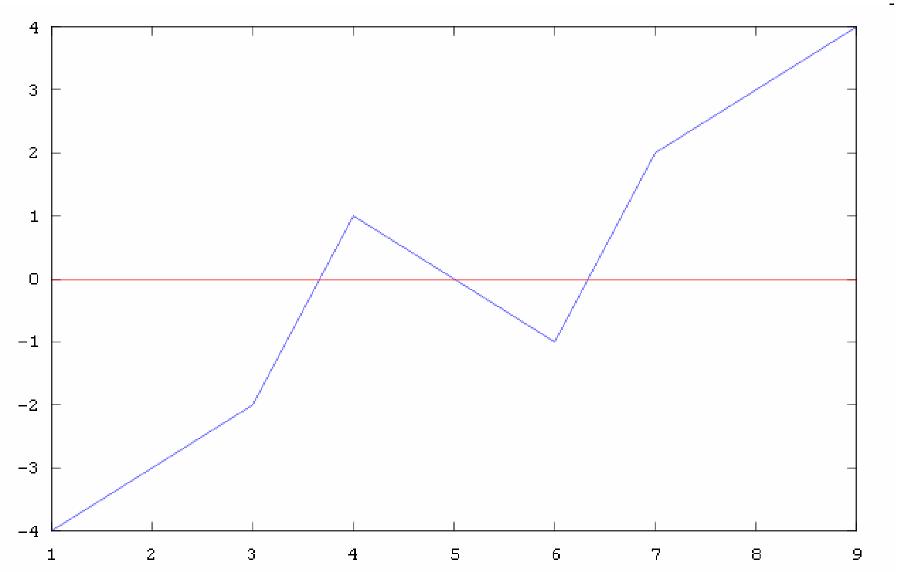
Priemer (očakávanie)

```
octave> mean(A)
ans = 4
octave> plot(A,'b',repmat(mean(A),length(A),1),'r')
```

```
octave> X=A.-mean(A);
octave> mean(X)
ans = 0
octave> plot(X,'b',repmat(mean(X),length(X),1),'r')
```



pôvodný signál



centrovaný signál

Odchýľka a rozptyl

- Potrebujeme vyjadriť nakoľko sa ostatné hodnoty líšia od priemeru
- Správne riešenie: $E\left(\left|X-\mu\right|\right) = E\left(\sqrt{\left(X-\mu\right)^2}\right)$

- Približné diferencovateľné riešenie = smerodajná odchýľka

$$\sigma = \sqrt{E\left(\left(X-\mu\right)^2\right)}$$

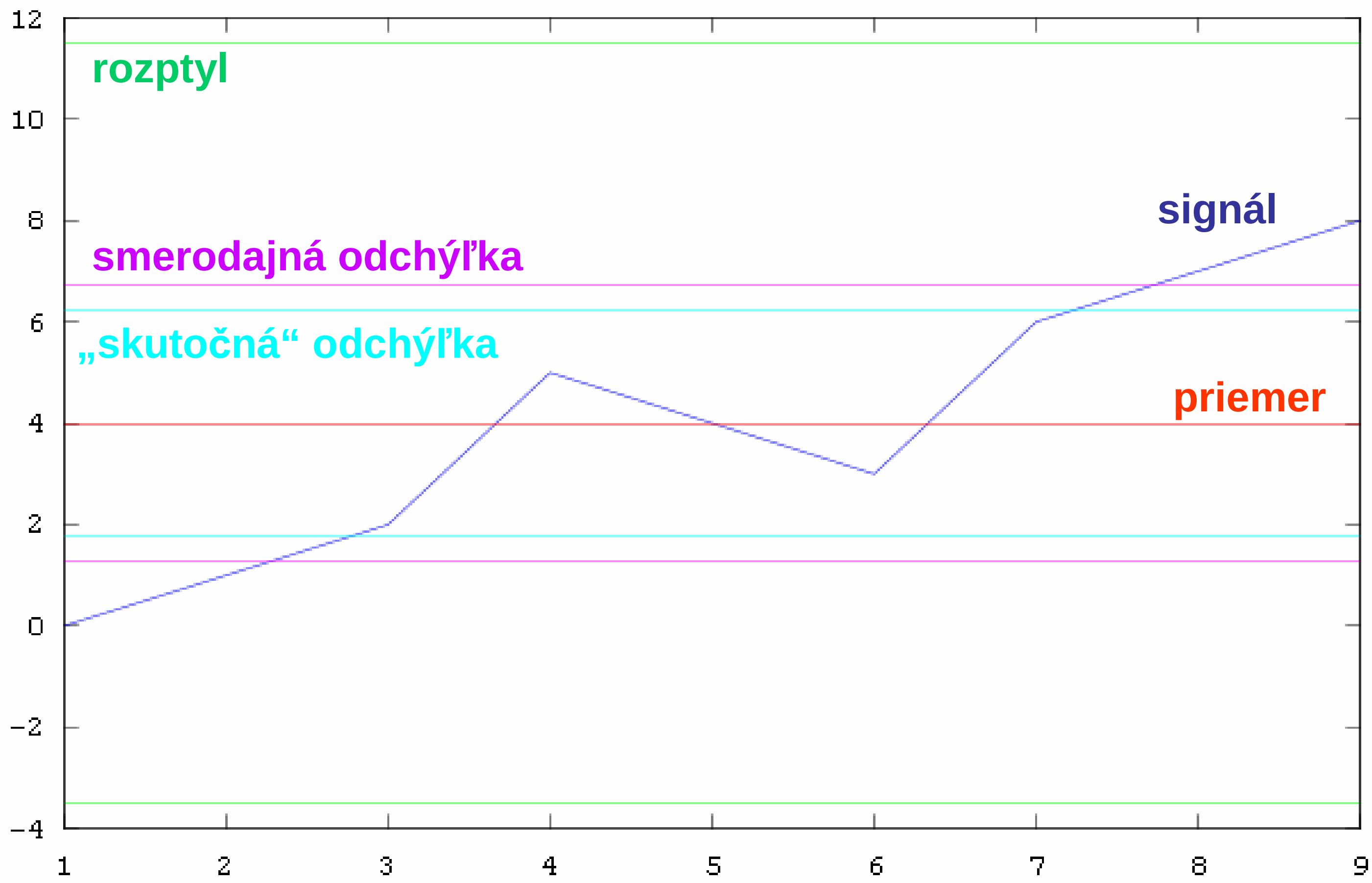
- Ľahšie sa vypočíta rozptyl

$$\sigma^2 = \mathrm{var}(X) = V = E\left(\left(X-\mu\right)^2\right)$$

Odchýľka a rozptyl

```
octave> var(A)
ans =  7.5000
octave> std(A)
ans =  2.7386
octave> std(A)*std(A)
ans =  7.5000
```

```
octave> for i=1:length(A)
> X(i)=abs(A(i)-mean(A));
> end
octave> mean(X)
```

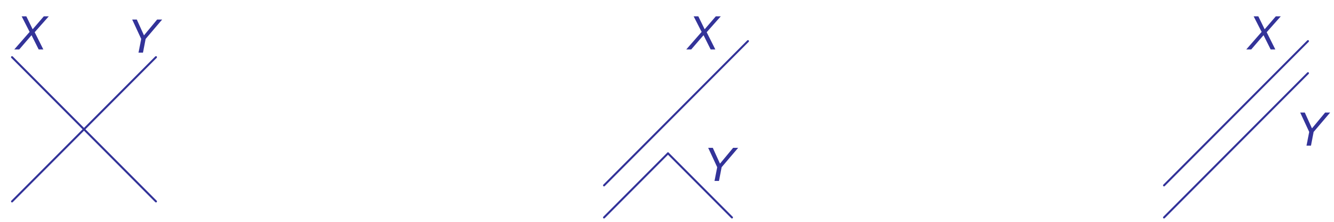



```
plot(A,'b',repmat(mean(A),length(A),1),'r',repmat(var(A)+mean(A),length(A),1),'g',repmat(std(A)+mean(A),length(A),1),
'm',repmat(mean(X)+mean(A),length(A),1),'c',repmat(mean(A)-var(A),length(A),1),'g',repmat(mean(A)-
std(A),length(A),1),'m',repmat(mean(A)-mean(X),length(A),1),'c')
```

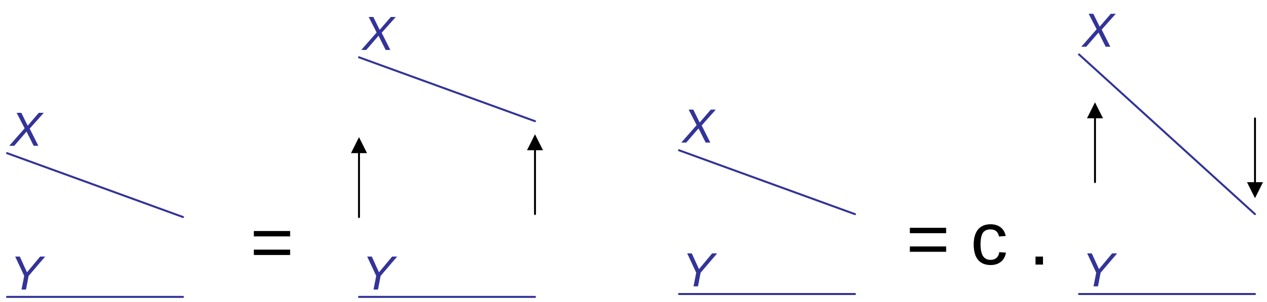
Kovariancia

Kovariancia dvoch signálov X a Y:

$$\mathrm{cov}(X,Y) \quad = \quad E\left(\left(X-\mu_X\right)\left(Y-\mu_Y\right)\right)$$



záporná nulová kladná



|cov(X,Y)| vyjadruje nakoľko je možné vyjadriť

X = a Y + b

sgn(cov(X,Y)) = sgn a

Korelácia

Korelácia - Normalizácia kovariancie do <-1,1>

$$cor(X,Y) = \frac{\operatorname{cov}(X,Y)}{\sigma_X \sigma_Y} = \cos\varphi$$

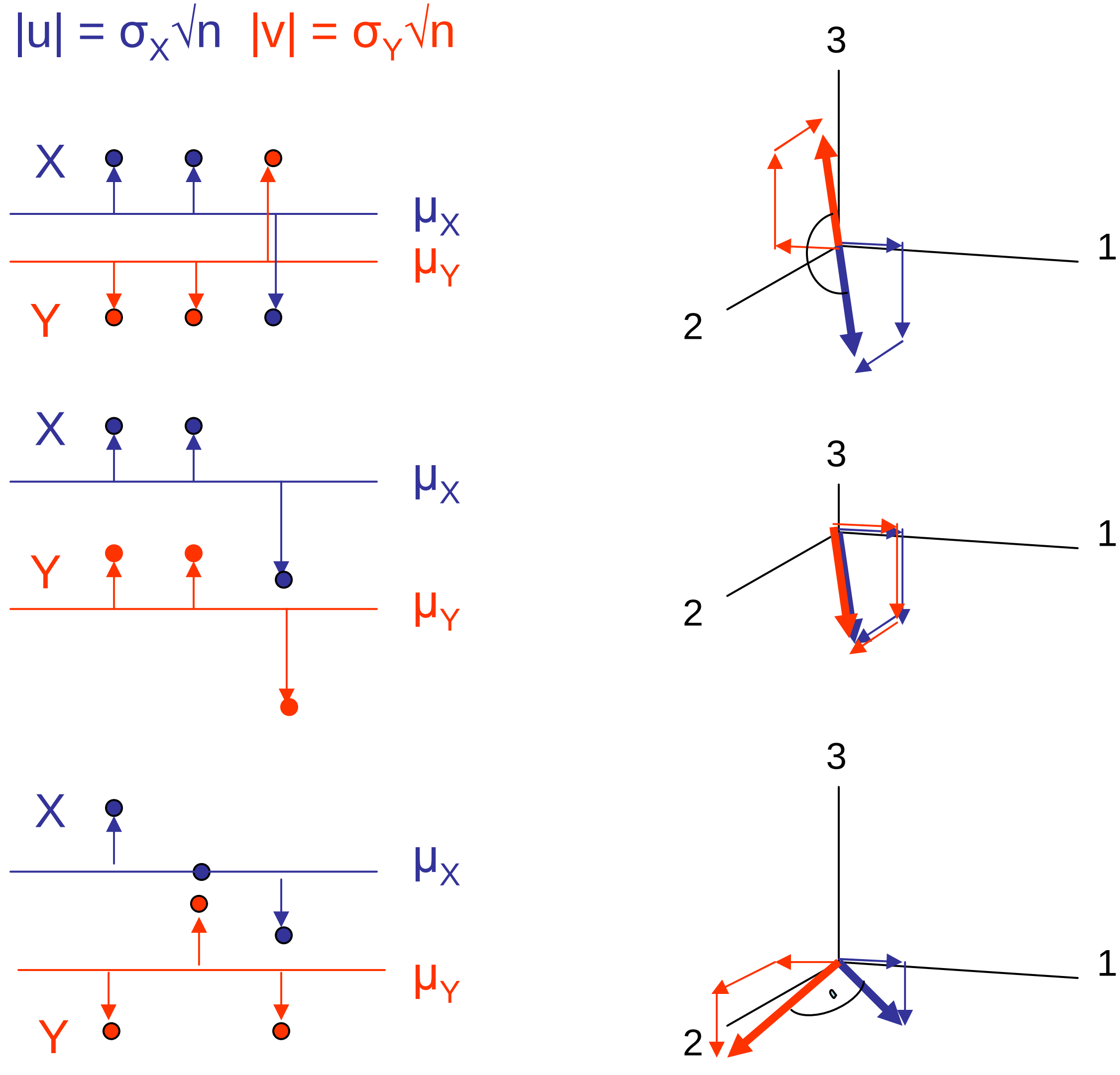
φ je uhol medzi n-rozmernými vektormi X-μ_X a Y-μ_Y

Geometrická interpretácia

$u = X-\mu_X$ $v = Y-\mu_Y$

$|u| = \sigma_X\sqrt{n}$ $|v| = \sigma_Y\sqrt{n}$

$$\cos\varphi = \frac{u \cdot v}{|u| \cdot |v|}$$



$\varphi = \pi$

cor(X,Y) = -1

$\varphi = 0$

cor(X,Y) = 1

$\varphi = \pi/2$

cor(X,Y) = 0

Variančno-kovariančná matica

- zovšeobecnenie rozptylu do viacerých dimenzií

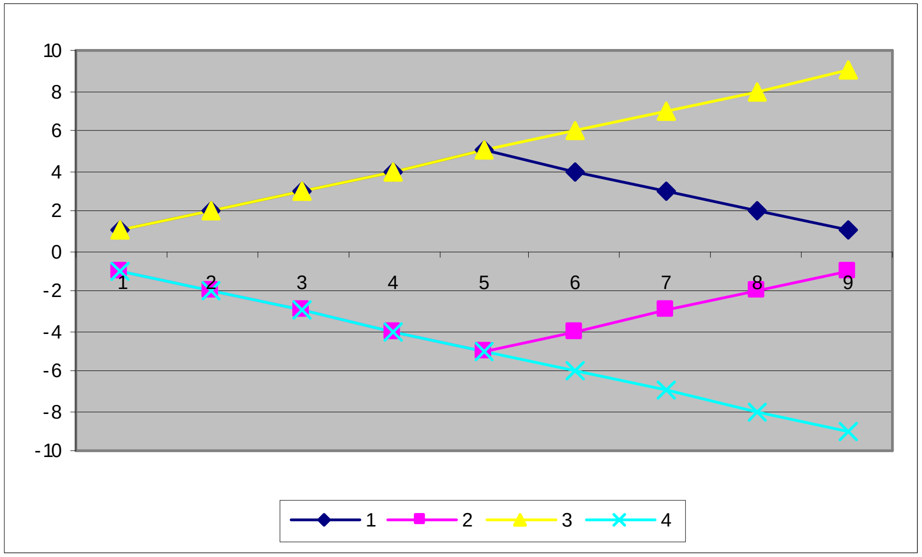
$X = [X_1, X_2, \ldots X_n]$

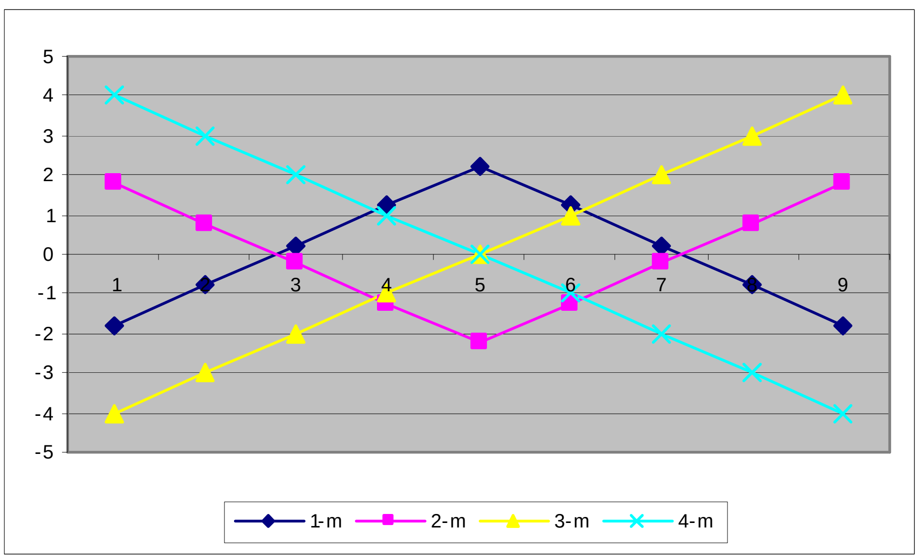
$$C_X = \operatorname{var}(\mathbf{X}) = \operatorname{cov}(\mathbf{X}) = \mathrm{E}\left[(\mathbf{X} - \mathrm{E}[\mathbf{X}])(\mathbf{X} - \mathrm{E}[\mathbf{X}])^T\right]$$

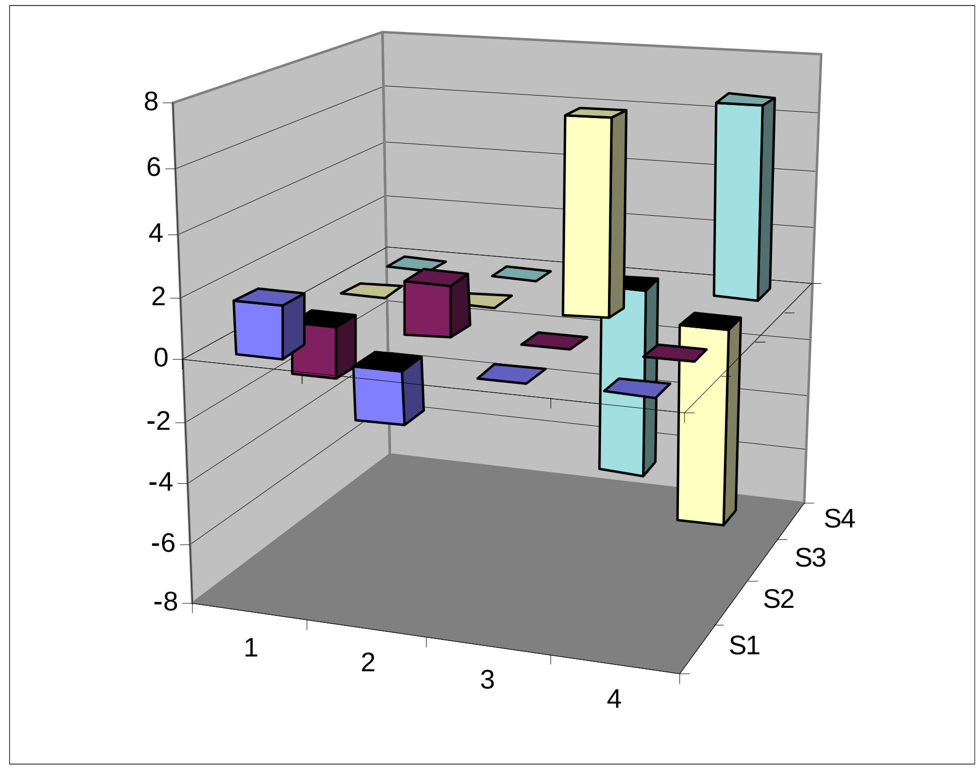
$$= \mathrm{E}\left[(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j)\right]$$

$$= \begin{bmatrix} \mathrm{E}[(X_1-\mu_1)(X_1-\mu_1)] & \mathrm{E}[(X_1-\mu_1)(X_2-\mu_2)] & \cdots & \mathrm{E}[(X_1-\mu_1)(X_n-\mu_n)] \\ \mathrm{E}[(X_2-\mu_2)(X_1-\mu_1)] & \mathrm{E}[(X_2-\mu_2)(X_2-\mu_2)] & \cdots & \mathrm{E}[(X_2-\mu_2)(X_n-\mu_n)] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{E}[(X_n-\mu_n)(X_1-\mu_1)] & \mathrm{E}[(X_n-\mu_n)(X_2-\mu_2)] & \cdots & \mathrm{E}[(X_n-\mu_n)(X_n-\mu_n)] \end{bmatrix}.$$

Variančno-kovariančná matica







Príklad pre 2-dim. dáta

2-dim. dáta

centrované dáta

$$x_i^{(j)} = a_i^{(j)} - \sum_k a_i^{(k)} / n$$

$$A = \begin{pmatrix} a_1^{(1)} & a_2^{(1)} \\ a_1^{(2)} & a_2^{(2)} \\ a_1^{(3)} & a_2^{(3)} \\ & \\ a_1^{(n)} & a_2^{(n)} \end{pmatrix} \qquad X = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} \\ x_1^{(3)} & x_2^{(3)} \\ & \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^{(1)} \\ x^{(2)} \\ x^{(3)} \\ \\ x^{(n)} \end{pmatrix} = A - E(A)$$

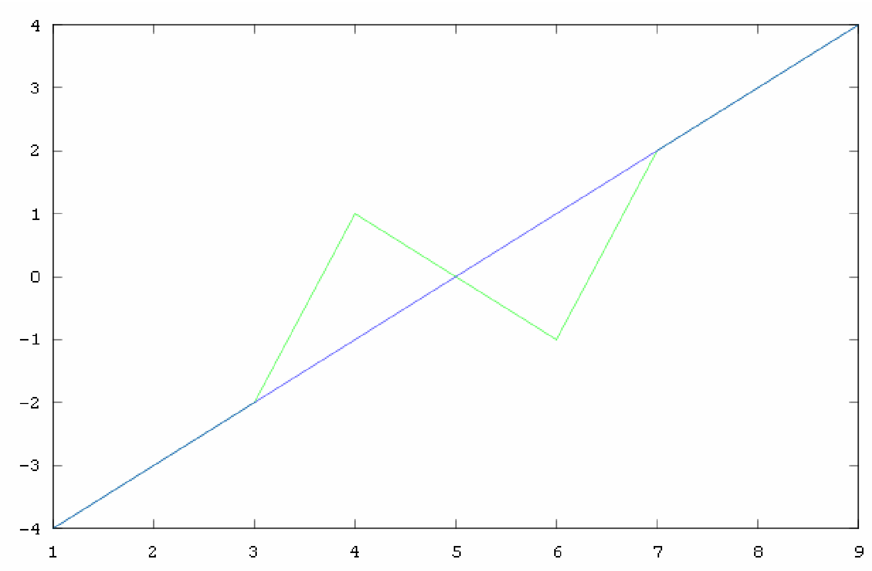
$$x^{(j)} = (x_1^{(j)}\ x_2^{(j)})$$

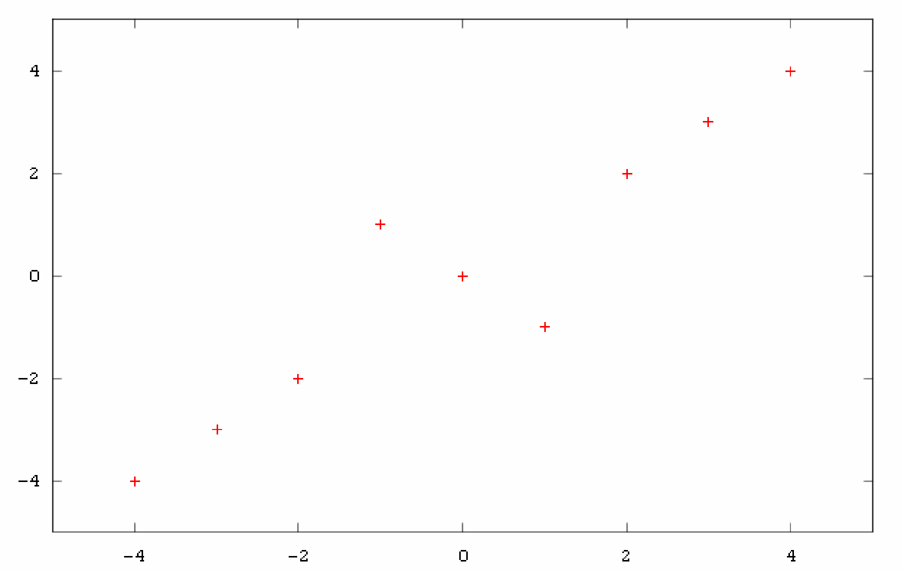
$$x^{(j)T}x^{(j)} = \begin{bmatrix} x_1^{(j)}x_1^{(j)} & x_1^{(j)}x_2^{(j)} \\ x_2^{(j)}x_1^{(j)} & x_2^{(j)}x_2^{(j)} \end{bmatrix}$$

$$C_X = \begin{pmatrix} \frac{\sum_i x_1^{(i)} x_1^{(i)}}{n} & \frac{\sum_i x_1^{(i)} x_2^{(i)}}{n} \\ \frac{\sum_i x_2^{(i)} x_1^{(i)}}{n} & \frac{\sum_i x_2^{(i)} x_2^{(i)}}{n} \end{pmatrix} = E(x^T x)$$

Príklad pre 2-dim. dáta

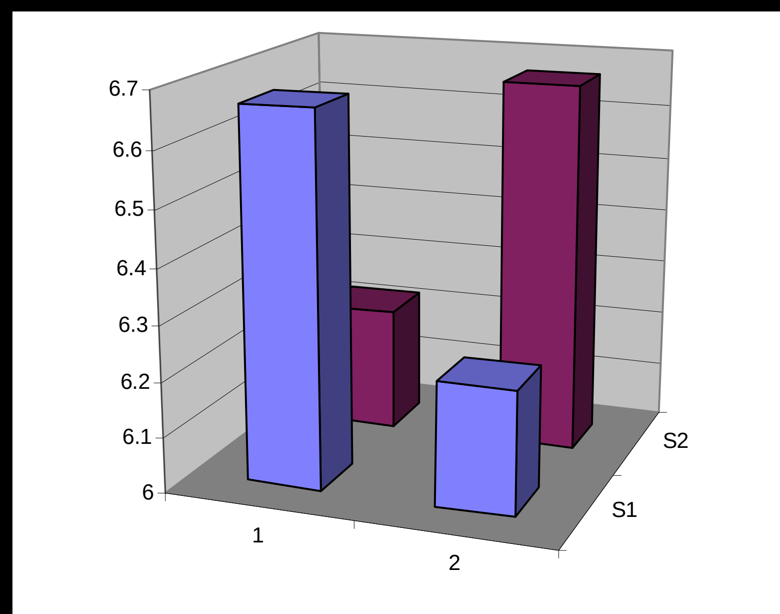
```
octave> A = [ -4 -4; -3 -3; -2 -2; 1 -1; 0 0; -1 1; 2 2; 3 3; 4 4]
A =
  -4  -4
  -3  -3
  -2  -2
   1  -1
   0   0
  -1   1
   2   2
   3   3
   4   4
octave> plot(A(:,1),'g', A(:,2),'b');
octave> plot(A(:,1), A(:,2),'r+'); axis([-5 5 -5 5]);
```





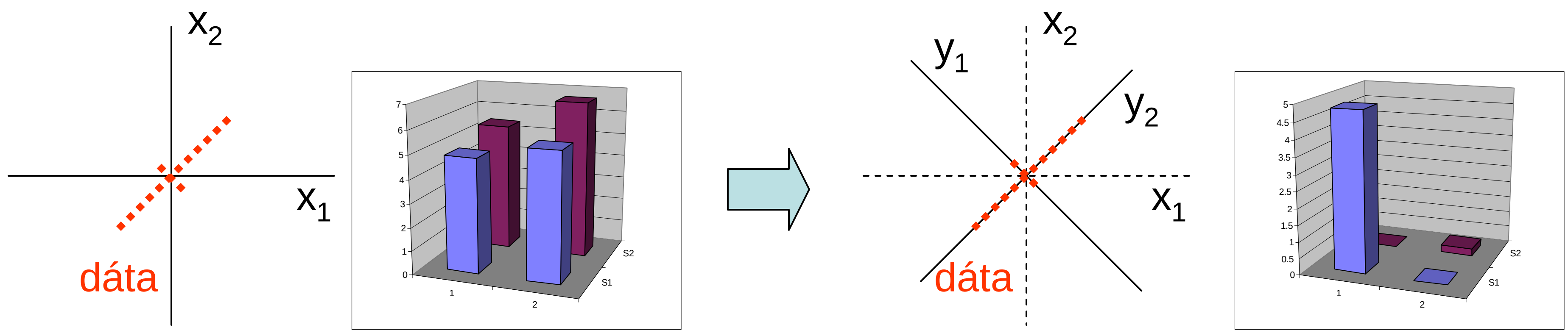
Príklad pre 2-dim. dáta

```
octave> X = A - repmat(mean(A),length(A),1)
X =
  -4  -4
  -3  -3
  -2  -2
   1  -1
   0   0
  -1   1
   2   2
   3   3
   4   4

octave> mean(X)
ans =
   0   0

octave> CX = cov(X)
CX =
   7.5000   7.0000
   7.0000   7.5000
```



PCA (Principal component analysis)

- Transformácia priestoru dát do priestoru, v ktorom je ich C_X diagonálna = medzi jednotlivými zložkami dát niet žiadnej korelácie

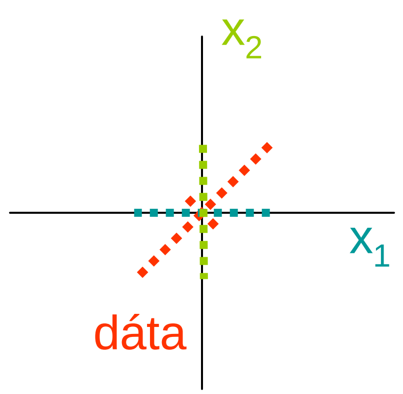


- Pre jednoduchosť prepokladáme, že dáta sú centrované (odrátame od nich ich priemer) a teda hľadáme iba otočenie o vhodný uhol, pritom zväčšenie resp. zmenšenie nevadí

PCA (Principal component analysis)

- Hľadáme teda zmenu bázy, t.j.regulárnu maticu (otočenie + zväčšenie/zmenšenie) P takú, že

$$XP = Y \quad \text{a} \quad C_Y \text{ je diagonálna}$$



$$\begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_2^{(1)} \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} \\ x_1^{(3)} & x_2^{(3)} \\ & \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1^{(1)} & y_2^{(1)} \\ y_1^{(2)} & y_2^{(2)} \\ y_1^{(3)} & y_2^{(3)} \\ & \\ y_1^{(n)} & y_2^{(n)} \end{pmatrix}$$

- centrovanie dát sa zmenou bázy nepokazí, ak bolo centrované X, bude centrované aj Y, lebo $E(Y) = E(XP) = E(X)P = \overline{0}\, P = \overline{0}$

PCA (Principal component analysis)

pre ľubovoľné P platí:

$C_Y = E(Y^TY) = E((XP)^TXP) = E(P^TX^TXP) =$

$= P^T E(X^TX) P = P^T C_X P$

Pre C_X sa dajú nájsť jej vlastné hodnoty a vektory (je to symetrická matica):

$$\alpha_i C_X = \lambda_i \alpha_i \quad C_X = \alpha^{-1} \Lambda \alpha \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

α_i sú ortogonálne, dajú sa z normalizovať a potom: $\alpha^{-1} = \alpha^T$

Takže keď položíme $P = \alpha^T$ dostávame:

$$C_Y = P^T C_X P = P^T \alpha^{-1} \Lambda \alpha P = \alpha \alpha^{-1} \Lambda \alpha \alpha^T = \Lambda$$

Hľadanou transformáciou je matica, kde sú po stĺpcoch normalizované vlastné vektory C_X

PCA (Principal component analysis)

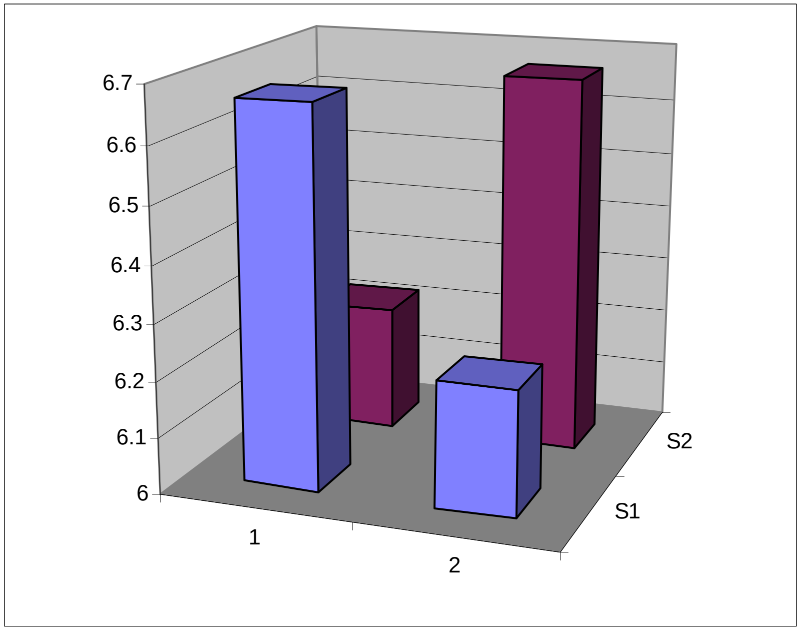
- Matica P, kde sú po stĺpcoch normalizované vlastné vektory C_X transformuje dáta to priestoru, kde sú ich jednotlivé zložky nekorelujúce $y = xP$
- absolútna hodnota vlastných hodnôt C_X dáva navyše informáciu aký vplýv má daný principálny komponent, čo môže (ale nemusí) súvisieť s jeho významnosťou

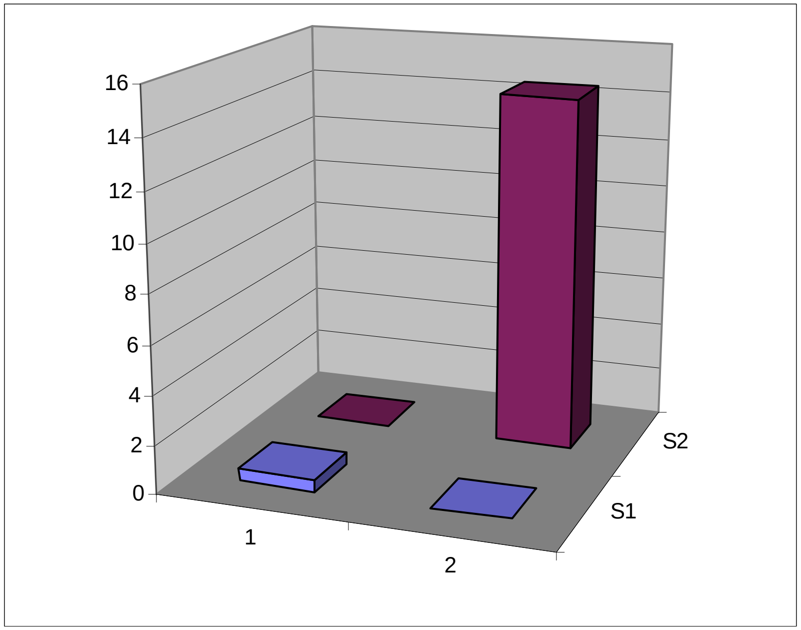
PCA

```
octave> CX=cov(X)
CX =

  7.5000   7.0000
  7.0000   7.5000

octave> [V,L]=eig(CX)
V =

 -0.70711   0.70711
  0.70711   0.70711

L =

   0.50000    0.00000
   0.00000   14.50000
```

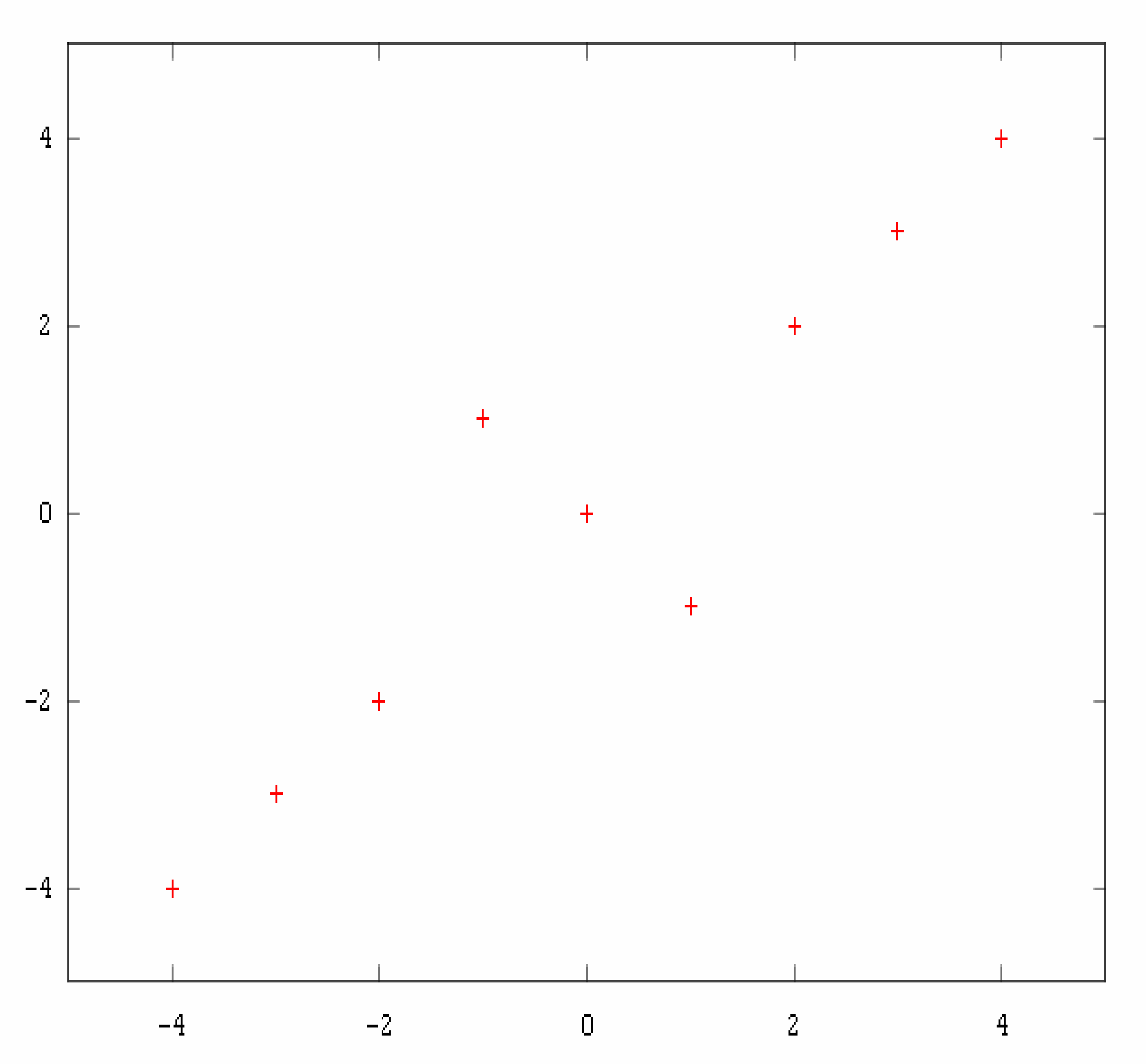
```
octave> Y=X*V
Y =

   0.00000  -5.65685
   0.00000  -4.24264
   0.00000  -2.82843
  -1.41421   0.00000
   0.00000   0.00000
   1.41421   0.00000
   0.00000   2.82843
   0.00000   4.24264
   0.00000   5.65685

octave> CY=cov(Y)
CY =

   0.50000    0.00000
   0.00000   14.50000
```

významnejší
komponent



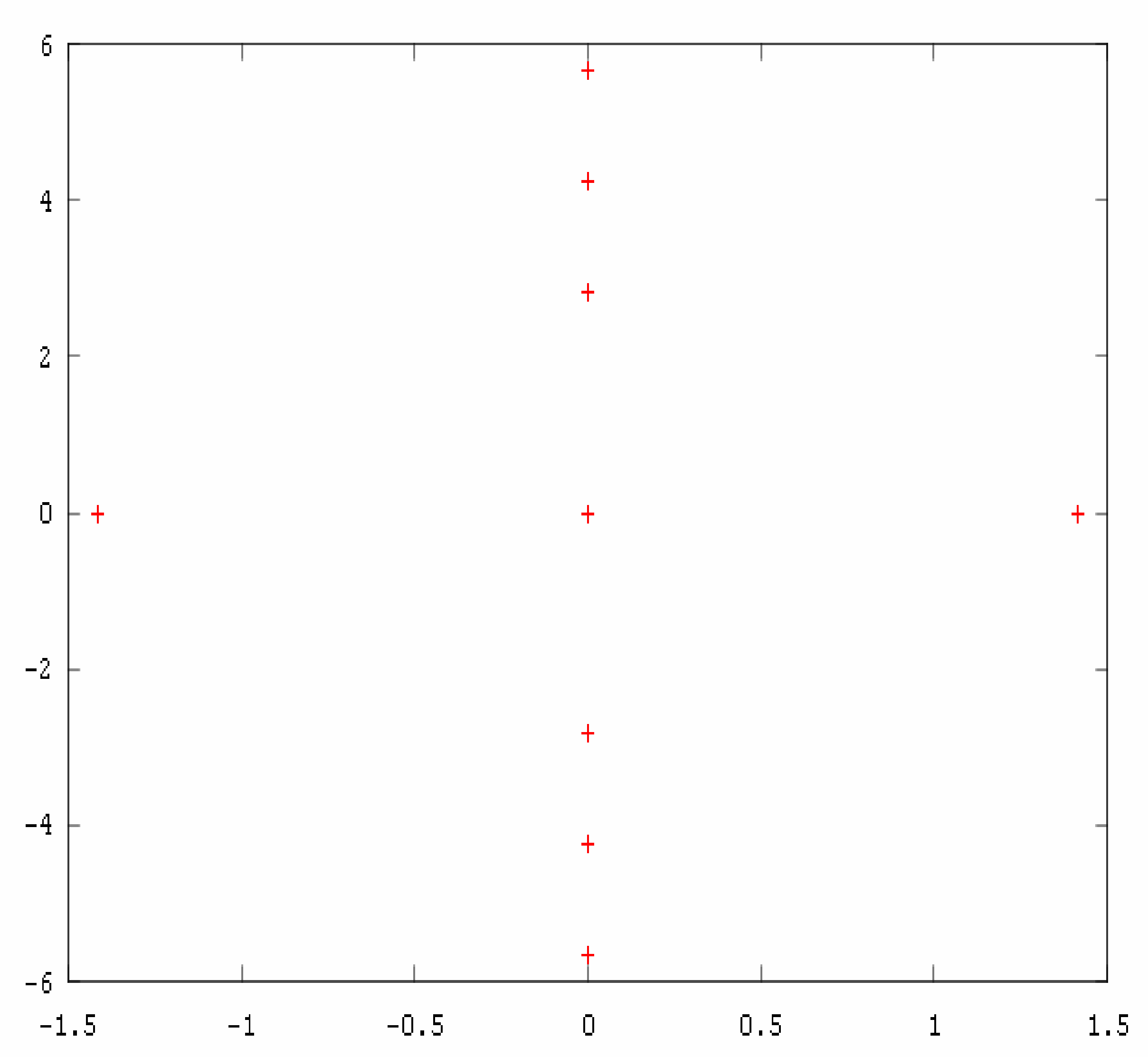


PCA



pôvodné dáta

PCA

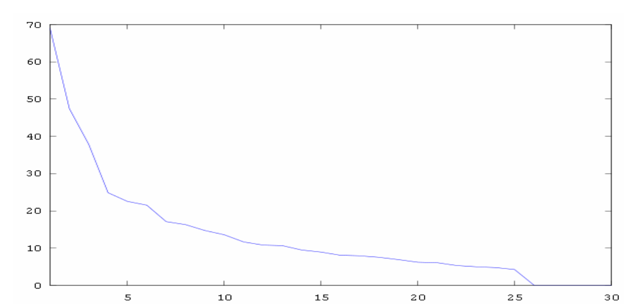


transformované dáta

PCA (Principal component analysis)

Príklad použitia:

- rozpoznávanie tvárí

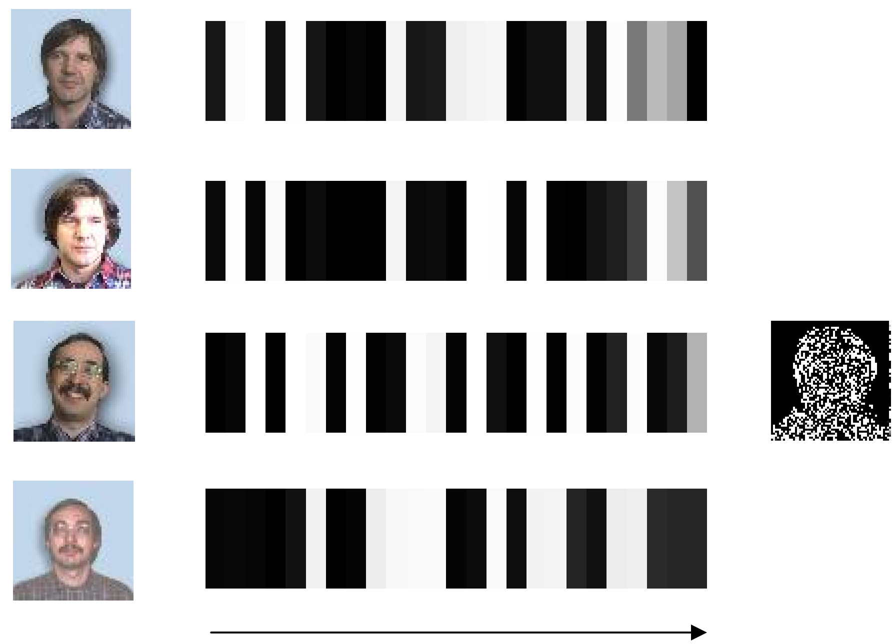


Fotky 60x60

Sada 26 fotiek

(bez predspracovania)

z 3600 bodov PCA dala (iba!) 25 hlavných komponentov (zvyšných 3575 má takmer nulovú vlastnú hodnotu)



Použitie PCA

- Rozpoznávanie
- Stratová kompresia
- Zmenšenie dimenzie dát
- Oddeľovanie zložiek signálu
- Odšumenie signálu
- Rekonštrukcia dát

Aplikovateľnosť je obmedzená numerickou stabilitou v rámci danej aplikačnej domény

Ďakujem za pozornosť !

Principal Component Analysis

Andrej Lúčny

Katedra aplikovanej informatiky FMFI UK

lucny@fmph.uniba.sk

http://www.fmph.uniba.sk/~lucny