AI Community

6. Понижение размерности

План на сегодня

1. Понижение размерности
   a. Определение
   b. Применение
   c. Подходы

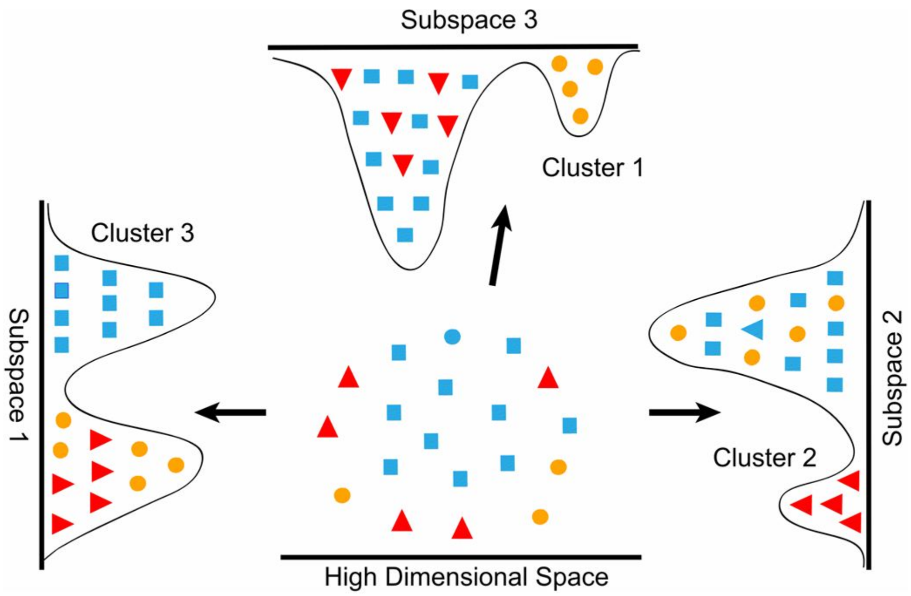
2. PCA
   a. Постановка задачи
   b. Решение

3. t-SNE
   a. Многомерное шкалирование
   b. SNE
   c. t - SNE

Понижение размерности

Понижение размерности

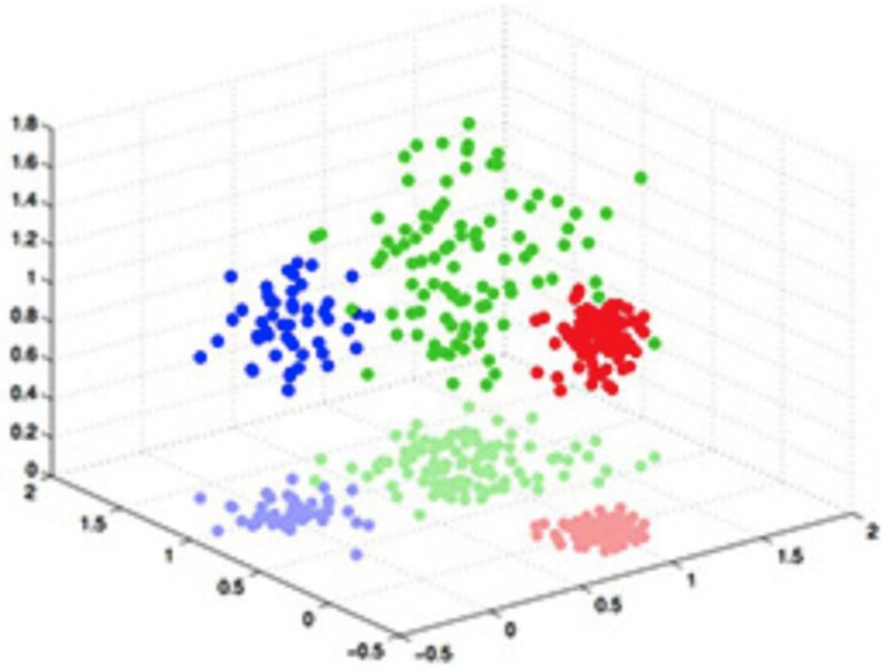
Понижение размерности представляет собой преобразование данных из пространства большой размерности в пространство низкой размерности, так что представление низкой размерности сохраняет некоторые значимые свойства исходных данных.



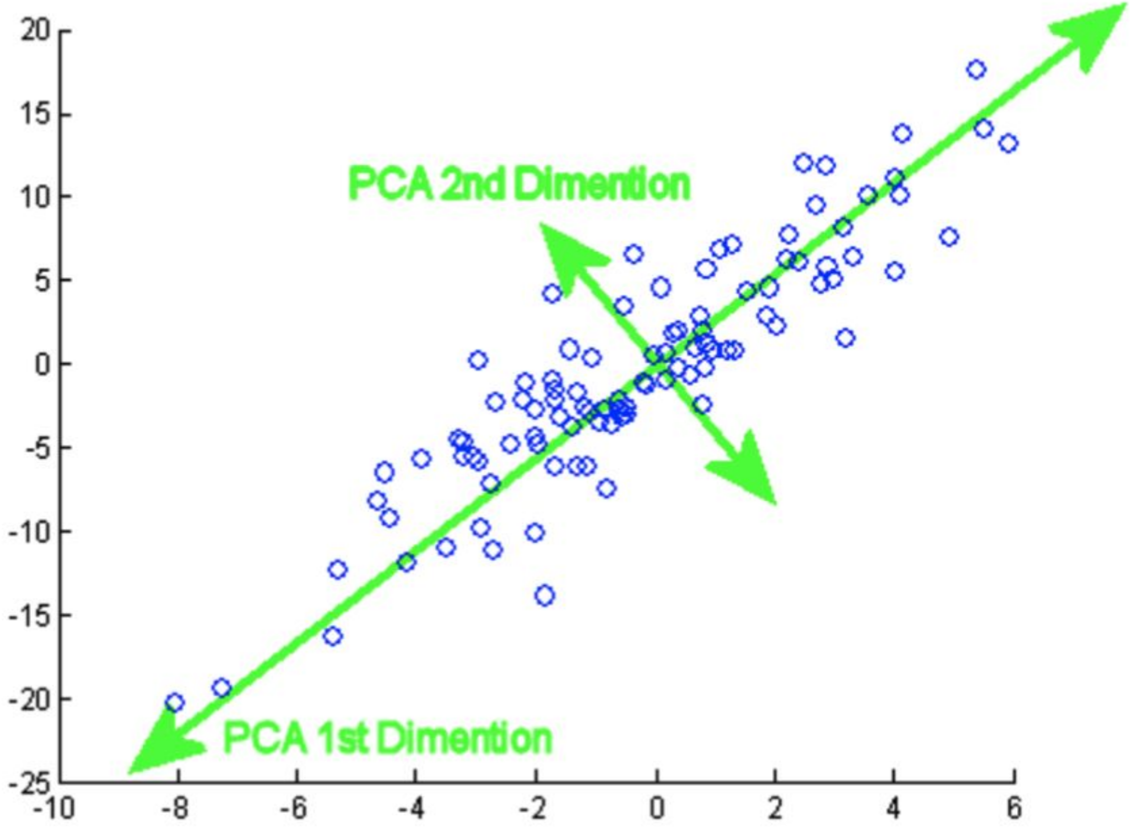
Зачем нужно понижать размерность?

- Необработанные данные часто являются разреженными
- Облегчает визуализацию и анализ данных
- Пространство, необходимое для хранения данных, уменьшается по мере уменьшения числа измерений
- Меньшие размеры приводят к уменьшению времени для вычислений/обучения

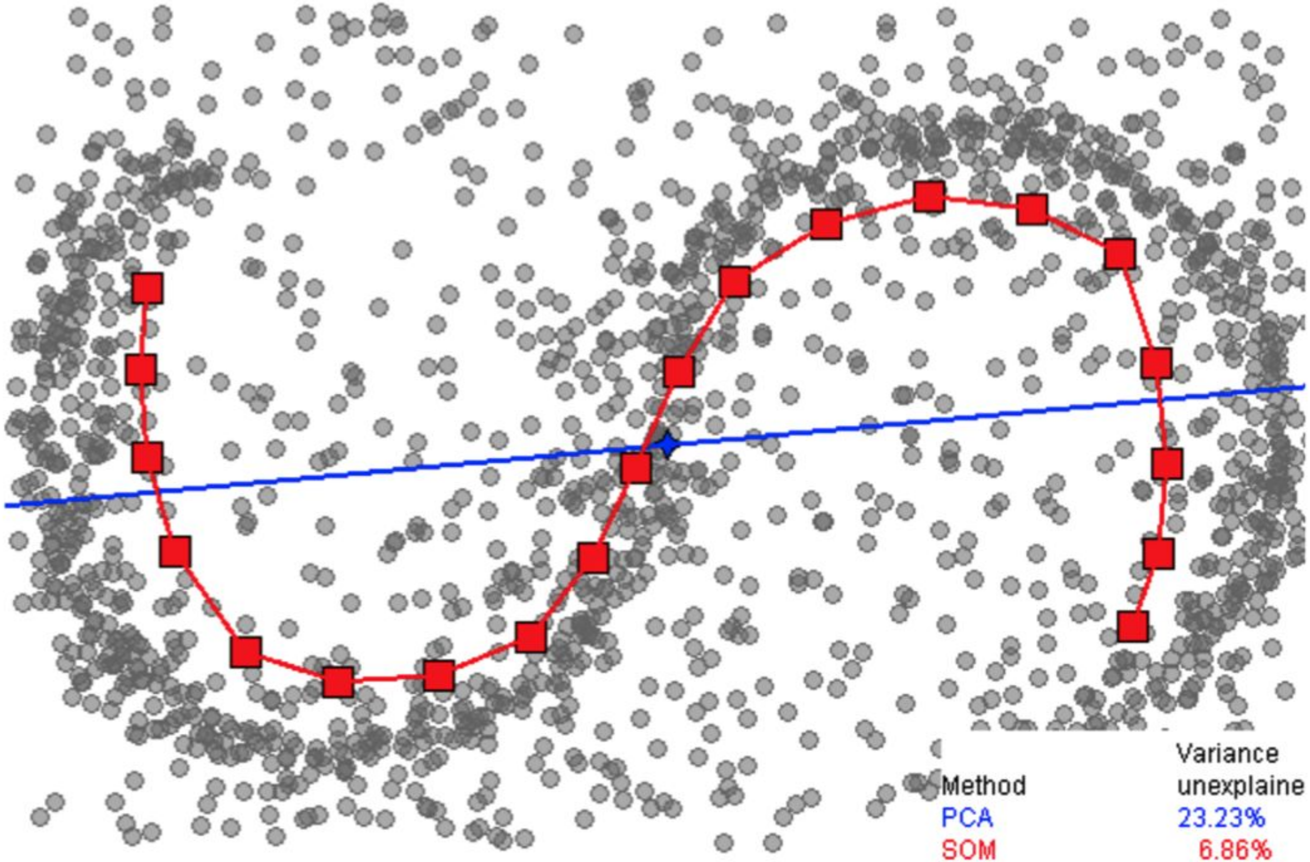
Почему просто не отобрать признаки?



Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

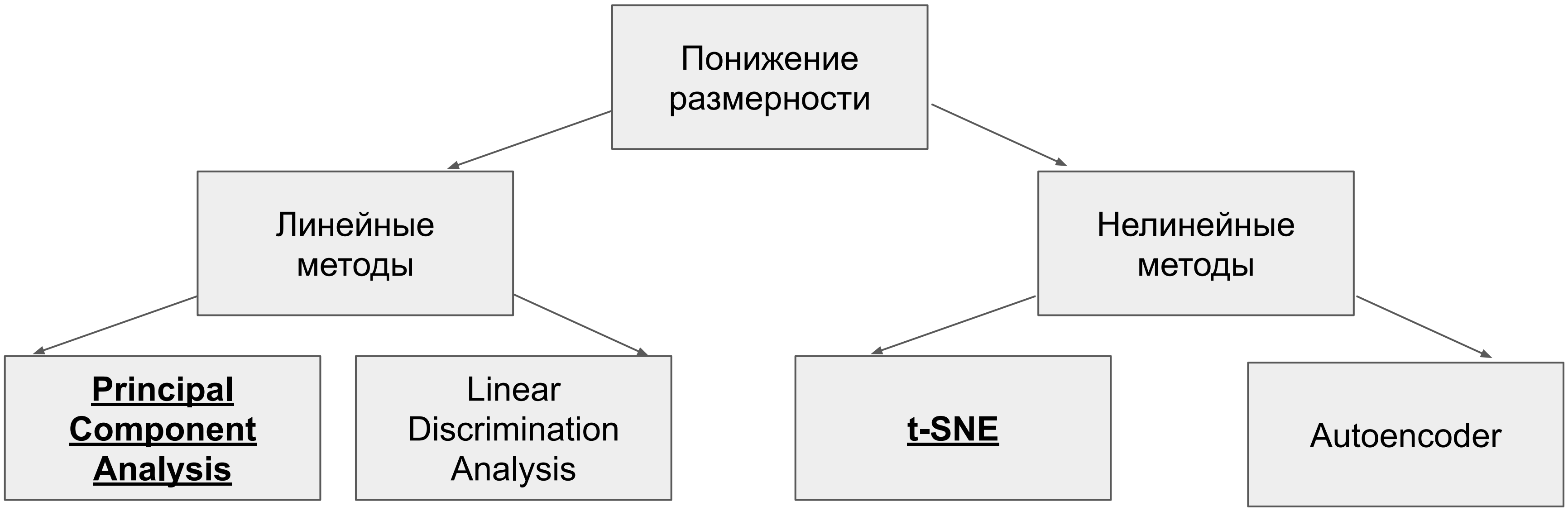


Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund



Source: Курс "Поиск структуры в данных" автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

Некоторые подходы понижения размерности



Principal Component Analysis (PCA)

Постановка задачи

- Исходные признаки: x_{ij}, D
- Новые признаки: z_{ij}, d
- Линейный подход

$$z_{ij} = \sum_{k=1}^{D} \mathrm{w}_{jk} x_{ik}$$

Новые признаки

Исходные признаки

Вклад исходного k-го признака в новый j-й

Матричный вид

$$z_{ij} = \sum_{k=1}^{D} \mathrm{w}_{jk} x_{ik} = \sum_{k=1}^{D} x_{ik} \mathrm{w}_{kj}^{T} \longrightarrow Z = XW^T$$

Чтобы у этого уравнения существовало единственное решение, необходимо:

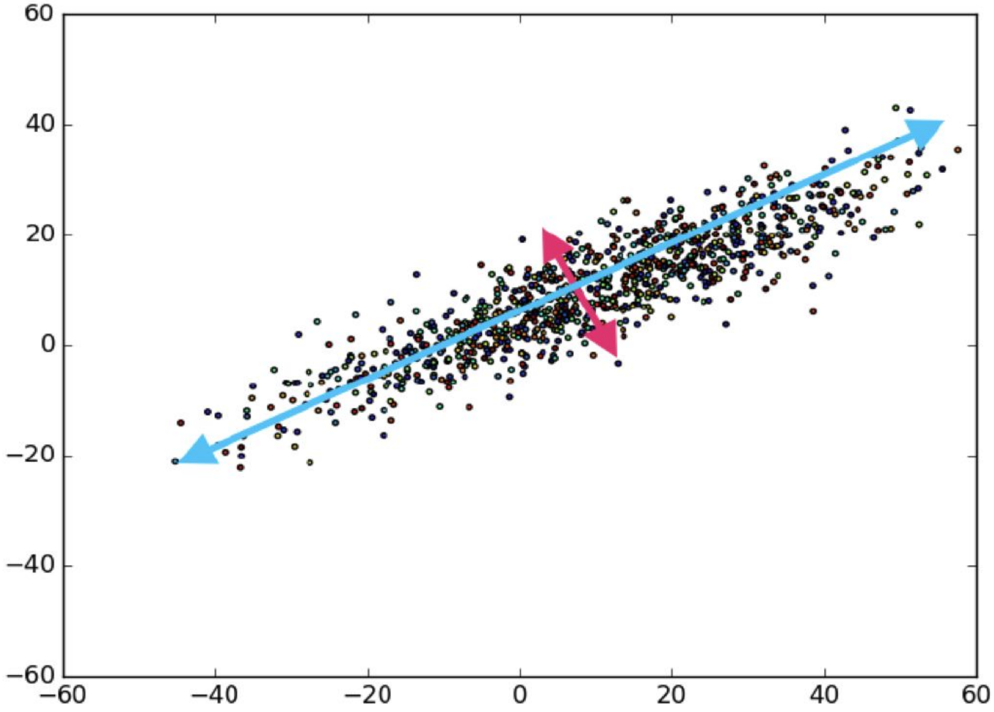
$$W^T W = I$$

, тогда

$$X = ZW$$

Задача: $\|X - ZW\|^2 \to \min\limits_{Z,W}$

Решение



Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

Максимизация дисперсии

$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{d} \mathrm{w}_j^T X^T X \mathrm{w}_j \to \max\limits_{W} \\ W^T W = I \end{cases}$$

Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

Максимизация дисперсии

$$\begin{cases} \mathrm{w}_1^T X^T X \mathrm{w}_1 \to \max\limits_{\mathrm{w}_1} \\ \mathrm{w}_1^T \mathrm{w}_1 = I \end{cases}$$

Максимизация дисперсии

$$\begin{cases} \mathrm{w}_1^T X^T X \mathrm{w}_1 \to \max\limits_{\mathrm{w}_1} \\ \mathrm{w}_1^T \mathrm{w}_1 = I \end{cases}$$

$$X^T X \mathrm{w}_1 = \lambda \mathrm{w}_1$$

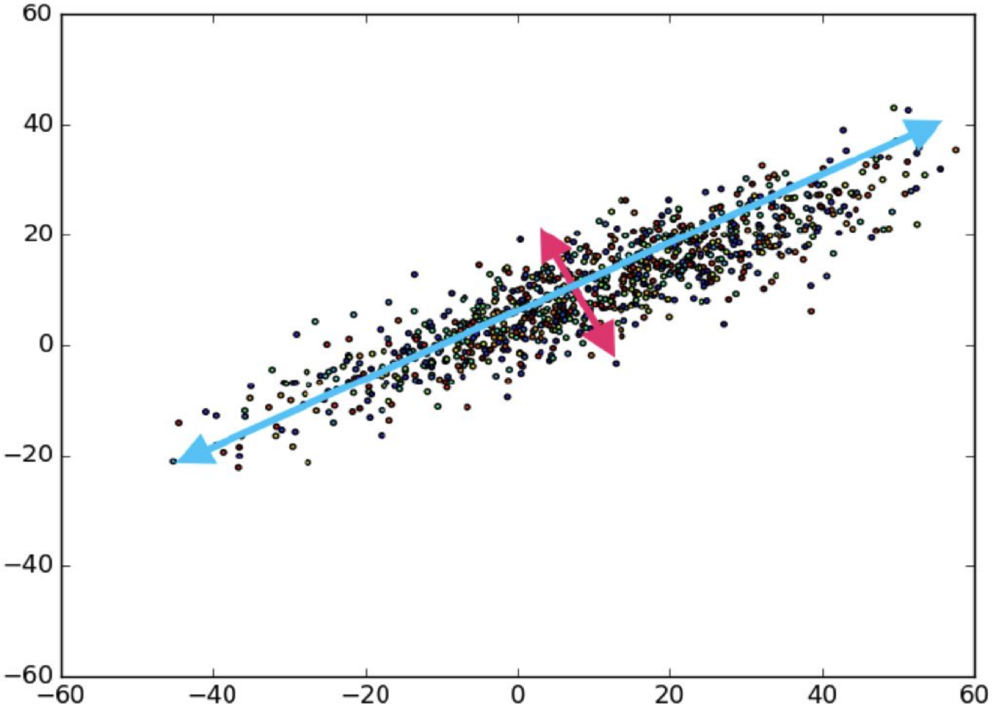
Максимизация дисперсии

$$\begin{cases} \mathrm{w}_1^T X^T X \mathrm{w}_1 \to \max\limits_{\mathrm{w}_1} \\ \mathrm{w}_1^T \mathrm{w}_1 = I \end{cases}$$

$$X^T X \mathrm{w}_1 = \lambda \mathrm{w}_1$$

$$\mathrm{w}_1^T X^T X \mathrm{w}_1 = \lambda$$

Решение



Сингулярное разложение

- $X = UDV^T$
- Столбцы U — собственные векторы XX^T
- Столбцы V — собственные векторы X^TX
- Диагональ D — ненулевые собственные значения XX^T и X^TX (сингулярные числа)

Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

Сингулярное разложение

- Найти сингулярное разложение матрицы X
- Сформировать матрицу весов W из собственных векторов
- Преобразование признаков $Z = XW$

Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

t-distributed Stochastic Neighbor Embedding (t-SNE)

Многомерное шкалирование

$$\sum_{i<j}^{\ell} (\|\tilde{x}_i - \tilde{x}_j\| - d_{ij})^2 \to \min_{\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_\ell}$$

Source: Курс “Поиск структуры в данных” автор: Московский физико-технический институт, Яндекс & E-Learning Development Fund

SNE

Если

$$\rho(x_i, x_j) = \alpha\rho(x_i, x_k)$$

, то

$$\rho(\tilde{x}_i, \tilde{x}_j) = \alpha\rho(\tilde{x}_i, \tilde{x}_k)$$

t-SNE

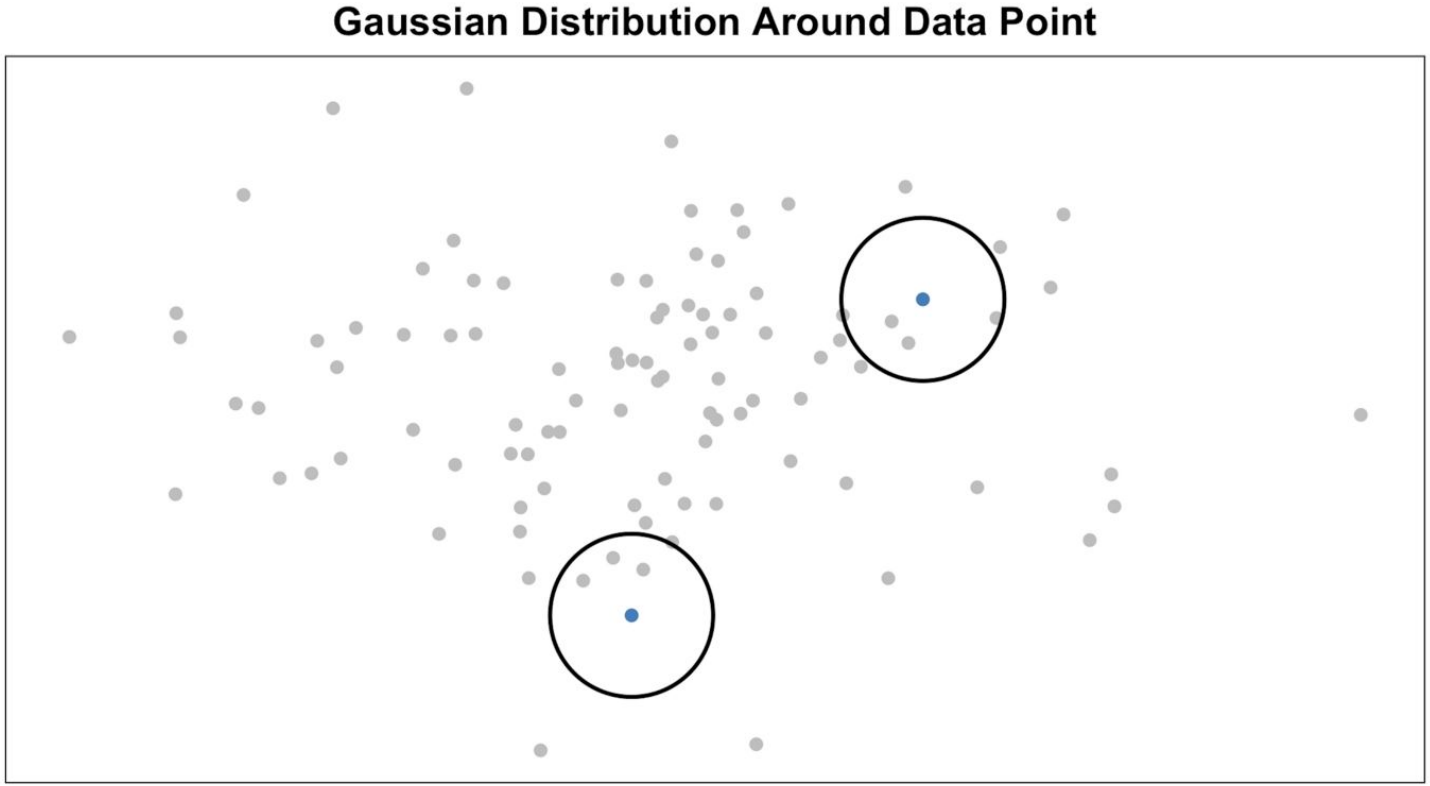
Если

$$\rho(x_i, x_j) = \alpha\rho(x_i, x_k)$$

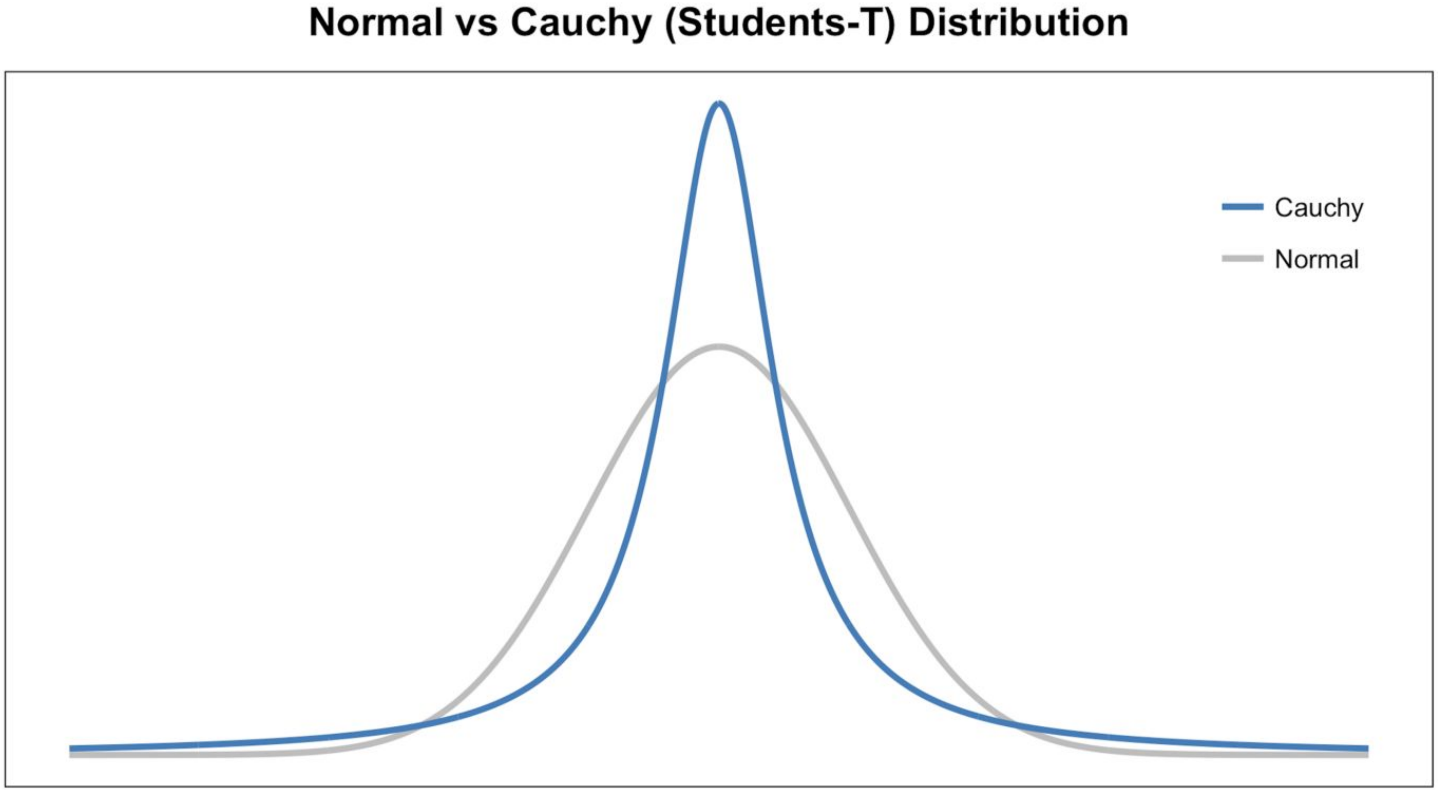
, то

$$\rho(\tilde{x}_i, \tilde{x}_j) = \alpha\rho(\tilde{x}_i, \tilde{x}_k)$$

t-SNE. Step 1



t-SNE. Step 2



t-SNE. Step 3

$$\sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j \neq i} p(x_j | x_i) \log \frac{p(x_j | x_i)}{q(\tilde{x}_j | \tilde{x}_i)} \to \min_{\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_\ell}$$