μ-izometrična aproksimacija difuzijskog preslikavanja

prema Salhov et al., Appl. Comput. Harmon. Anal. 38 (2015)

D. Đivanović K. Gjogolović M. Pavičić

Cilj

$\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^m$ mnogostrukost intrinzične dimenzije $\delta \ll m$, $M \subset \mathcal{M}$ diskretni skup s $|M| = n$ točaka

Za preslikavanja $\Phi : M \to \mathbb{R}^\delta$ i $\widehat{\Phi} : M \to \mathbb{R}^{\widehat{\delta}}$ kažemo da su μ-***izometrična*** ako vrijedi

$$\boxed{\left| \|\widehat{\Phi}(x) - \widehat{\Phi}(y)\| - \|\Phi(x) - \Phi(y)\| \right| \leq \mu, \qquad \forall\, x, y \in M}$$

Želimo pronaći preslikavanje $\widehat{\Phi} : M \to \mathbb{R}^{\widehat{\delta}}$ koje je μ-izometrično **difuzijskom preslikavanju** $\Phi : M \to \mathbb{R}^\delta$

Difuzijsko preslikavanje

Gaussova jezgra za $\varepsilon > 0$:

$$k(x,y) \;=\; \exp\Big(-\frac{\|x-y\|^2}{\varepsilon}\Big), \qquad x,y \in M \qquad \Longrightarrow \qquad \text{matrica } K$$

Stupanj povezanosti svakog podatka s preostalima:

$$q(x) \;=\; \sum_{y\in M} k(x,y) \qquad \Longrightarrow \qquad \text{matrica } Q = \operatorname{diag}(q(x_1),\dots,q(x_n))$$

Normiranje matrice K:

$$P \;=\; Q^{-1}K$$

$\Longrightarrow$ Markovljeva matrica, slična simetričnoj matrici

$$A \;=\; Q^{1/2}PQ^{-1/2} = \; Q^{-1/2}KQ^{-1/2}$$

Difuzijsko preslikavanje

Matrice A i P imaju isti spektar, a svojstveni vektori se razlikuju za faktor $Q^{-1/2}$

Difuzijsko preslikavanje želimo definirati preko svojstvenih parova matrice P

$\Longrightarrow$ određivanje spektralne dekompozicije matrice P svodi se na računanje spektralne dekompozicije simetrične matrice A

Difuzijsko preslikavanje

$1 = \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n > 0$ svojstvene vrijednosti, $\phi_1, \ldots, \phi_n$ pripadni ortonormirani svojstveni vektori matrice A

$\implies$ svakom podatku $x \in M$ možemo pridružiti sljedeći vektor iz $\mathbb{R}^n$:

$$x \to \left[q(x)^{-1/2}\, \sigma_1 \phi_1(x),\ \ldots,\ q(x)^{-1/2}\, \sigma_n \phi_n(x) \right]$$

Difuzijsko preslikavanje

Spektar matrice A (i P) jako brzo opada $\Longrightarrow$ dovoljno je promatrati svojstvene parove za δ najvećih svojstvenih vrijednosti

Za dovoljno mali δ, difuzijsko preslikavanje (DM) $\Phi : \mathcal{M} \to \mathbb{R}^\delta$ definiramo kao

$$\boxed{\Phi(x) \; = \; \Big[q(x)^{-1/2}\,\sigma_1\phi_1(x), \; \ldots, \; q(x)^{-1/2}\,\sigma_\delta\phi_\delta(x)\Big], \qquad \forall\, x \in M}$$

$\Longrightarrow$ δ je dimenzija nižedimenzionalnog prostora u koji ulažemo podatke iz prostora velike dimenzije M

Vrijedi:

$$\text{difuzijska udaljenost između } x \text{ i } y = ||\Phi(x) - \Phi(y)||, \qquad \forall\, x, y \in M$$

Konstrukcija aproksimacije

$\Longrightarrow$ računanje difuzijskog preslikavanja $\Phi : M \to \mathbb{R}^\delta$, $|M| = n$, svodi se na računanje SVD matrice dimenzije $n \times n$ $\Longrightarrow$ neefikasno za velike n

$\Longrightarrow$ aproksimirati ga preslikavanjem čije je **računanje efikasnije**

Izložit ćemo računalno efikasnu konstrukciju μ-**izometrične** aproksimacije difuzijskog preslikavanja u dva računalno efikasnija koraka:

Za skup S, $|S| = s < n$:

1. računanje **parcijalnog difuzijskog preslikavanja** $\widetilde{\Phi} : S \to \mathbb{R}^s$
   - egzaktno čuva difuzijske udaljenosti na S
2. računanje njegovog efikasnog **Nyströmova proširenja** $\widehat{\Phi} : M \to \mathbb{R}^s$ na cijeli skup
   - egzaktno čuva difuzijske udaljenosti na S
   - μ-izometrično difuzijskom preslikavanju na M
   - zasnovano na računanju spektralne dekompozicije matrice dimenzije $s \times s$

$\Longrightarrow$ s je dimenzija niždimenzionalnog prostora u koji ulažemo podatke iz prostora M

Parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM)

Neka je $S = \{x_1, \ldots, x_s\} \subset M$, $s < n$.

Neka je $\widetilde{K}$ = gornja $s \times n$ podmatrica matrice K

Neka je

$$\widetilde{Q} = \mathrm{diag}(\widetilde{q}(x_i))$$

dijagonalna matrica, gdje je

$$\widetilde{q}(x_i) = \sum_{j=1}^{n} \widetilde{k}(x_i, x_j), \;\; i = 1, 2, \ldots, s.$$

Neka je

$$\widetilde{A} \; = \; \widetilde{Q}^{-1/2} \, \widetilde{K} \, Q^{-1/2}$$

pravokutna $s \times n$ matrica

Parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM)

$$\widetilde{A} = \widetilde{Q}^{-1/2}\,\widetilde{K}\,Q^{-1/2}$$

Matrica $\widetilde{A}\widetilde{A}^T$ je kvadratna i simetrična, dimenzije $s \times s$, i njezine svojstvene vrijednosti jednake su kvadratima singularnih vrijednosti matrice $\widetilde{A}$, a lijevi singularni vektori matrice $\widetilde{A}$ razlikuju se od svojstvenih vektora matrice $\widetilde{A}\widetilde{A}^T$ za faktor $\widetilde{Q}^{-1/2}$

Parcijalno difuzijsko preslikavanje želimo definirati preko parova singularnih vrijednosti i lijevih singularnih vektora matrice $\widetilde{A}$

$\Longrightarrow$ određivanje SVD matrice $\widetilde{A}$ svodi se na računanje spektralne dekompozicije simetrične matrice $\widetilde{A}\widetilde{A}^T$

Parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM)

$1 = \widetilde{\sigma}_1^2 \geq \widetilde{\sigma}_2^2 \geq \cdots \geq \widetilde{\sigma}_s^2 > 0$, svojstvene vrijednosti, i $\widetilde{\phi}_1, \ldots, \widetilde{\phi}_s$, pripadni ortonormirani svojstveni vektori, matrice $\widetilde{A}\widetilde{A}^T$.

$\Longrightarrow$ parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM) $\widetilde{\Phi} : S \to \mathbb{R}^s$ definiramo kao

$$\boxed{\widetilde{\Phi}(x) \; = \; \left[\widetilde{q}(x)^{-1/2}\left(\widetilde{\sigma}_1\widetilde{\phi}_1(x)\right), \; \ldots, \; \widetilde{q}(x)^{-1/2}\left(\widetilde{\sigma}_s\widetilde{\phi}_s(x)\right)\right], \qquad \forall\, x \in S}$$

Parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM)

Može se lako pokazati

$$\|\widetilde{\Phi}(x) - \widetilde{\Phi}(y)\| = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|, \qquad \forall\, x, y \in S.$$

$\Longrightarrow$ PDM, jednako kao DM, čuva geometriju podataka na skupu S, tj. njihove difuzijske udaljenosti

Računanje DM svodi se na računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije $n \times n$, a računanje PDM svodi se na računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije $s \times s$, gdje je $s < n$

$\Longrightarrow$ difuzijske udaljenosti podataka iz skupa $S \subset M$, $|S| = s < n = |M|$ puno je efikasnije izračunati posredstvom parcijalnog nego posredstvom standardnog DM

Nyströmovo proširenje PDM-a na cijeli skup

Sada je cilj gore definirano PDM $\widetilde{\Phi} : S \to \mathbb{R}^s$ proširiti do preslikavanja $\widehat{\Phi} : M \to \mathbb{R}^s$,

ali takvog da

$$\|\widehat{\Phi}(x) - \widehat{\Phi}(y)\| = \|\widetilde{\Phi}(x) - \widetilde{\Phi}(y)\|, \qquad \forall\, x, y \in S.$$

$\Longrightarrow$ onda će, zbog takvog svojstva PDM, i prošireno preslikavanje čuvati geometriju podataka na skupu S, tj. njihove difuzijske udaljenosti

Nyströmovo proširenje PDM-a na cijeli skup

Rastavimo skup podataka M na skup S i njegov komplement $\overline{S}$ te zapišimo matricu A u sljedećem blok-obliku:

$$A = \begin{bmatrix} A_{S,S} & A_{S,\overline{S}} \\ A_{\overline{S},S}^{\top} & A_{\overline{S},\overline{S}} \end{bmatrix}.$$

Sada matricu $\widetilde{A}$ možemo napisati u blok-obliku

$$\widetilde{A} = \widetilde{Q}^{-1/2}\,\widetilde{K}\,Q^{-1/2} = \begin{bmatrix} A_{S,S} & A_{S,\overline{S}} \end{bmatrix}.$$

Nyströmovo proširenje PDM-a na cijeli skup

Klasična Nyströmova metoda proširenja difuzijskog preslikavanja polazi od spektralne dekompozicije matrice $A_{S,S}$,

$$A_{S,S} = \widetilde{\Psi}\,\widetilde{\Lambda}\,\widetilde{\Psi}^{\top},$$

i svojstva da svaka svojstvena vrijednost $\widetilde{\lambda}$ zadovoljava jednakost

$$\widetilde{\psi} = A_{S,S}\widetilde{\psi}\widetilde{\lambda}^{-1},$$

te, uzimajući u obzir zapis matrice A:

$$A = \begin{bmatrix} A_{S,S} & A_{S,\overline{S}} \\ A^{\top}_{\overline{S},S} & A_{\overline{S},\overline{S}} \end{bmatrix},$$

matricu A aproksimira na sljedeći način:

$$\widehat{\Psi} = \begin{bmatrix} \widetilde{\Psi} \\ A^{\top}_{\overline{S},S}\widetilde{\Psi}\,\widetilde{\Lambda}^{-1} \end{bmatrix}, \qquad \widehat{A} = \widehat{\Psi}\,\widetilde{\Lambda}\,\widehat{\Psi}^{\top} = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} & A_{(S,\bar{S})} \\ A^{T}_{(S,\bar{S})} & A^{T}_{(S,\bar{S})}\left(A_{(S,S)}\right)^{-1}A_{(S,\bar{S})} \end{bmatrix}.$$

Nyströmovo proširenje PDM-a na cijeli skup

Budući da se difuzijsko preslikavanje zasniva na spektralnoj dekompoziciji matrice A, možemo ga aproksimirati preslikavanjem koje se na analogan način zasniva na dekompoziciji matrice $\widehat{A}$,

$$\widehat{A} = \widehat{\phi}\Lambda\widehat{\phi}^T,$$

takvoj da je matrica $\widehat{\phi}$ dimenzije $n \times s$ čiji su stupci ortonormalni, dakle vrijedi

$$\widehat{\phi}^T\widehat{\phi} = I,$$

a Λ je dijagonalna matrica dimenzije $s \times s$.

U nastavku ćemo pokazati računski efikasan način računanja takve dekompozicije matrice $\widehat{A}$, koji uključuje računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije $s \times s$.

$\Longrightarrow$ računanje Nyströmova proširenja difuzijskog preslikavanja je računalno efikasnije od računanja preslikavanja koje zahtijeva računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije $n \times n$.

Ortogonalno Nyströmovo preslikavanje

Ortogonalno Nyströmovo preslikavanje (ONM) $\widehat{\Phi} : M \to \mathbb{R}^s$ definira se kao

$$\boxed{\widehat{\Phi}(x) = \left[q(x)^{-1/2}\,\lambda_1 \widehat{\phi}_1(x), \ldots, q(x)^{-1/2}\,\lambda_s \widehat{\phi}_s(x)\right] \qquad \forall\; x \in M}$$

Ortogonalno Nyströmovo preslikavanje

Može se lako pokazati da vrijedi

$$\|\widehat{\Phi}(x) - \widehat{\Phi}(y)\| = \|\widetilde{\Phi}(x) - \widetilde{\Phi}(y)\|, \qquad \forall\ x, y \in S.$$

Stoga, budući da vrijedi

$$\|\widetilde{\Phi}(x) - \widetilde{\Phi}(y)\| = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|, \qquad \forall\ x, y \in S,$$

onda vrijedi i

$$\|\widehat{\Phi}(x) - \widehat{\Phi}(y)\| = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|, \qquad \forall\ x, y \in S.$$

$\Longrightarrow$ ortogonalno Nyströmovo preslikavanje, jednako kao parcijalno, odnosno standardno DM, čuva geometriju podataka na skupu S, tj. njihove difuzijske udaljenosti

Efikasna konstrukcija Nyströmova preslikavanja

Najprije, može se pokazati da za svaku ortogonalnu matricu Ψ dimenzije $s \times s$ i svaku nesingularnu matricu Λ dimenzije $s \times s$ vrijedi da matrica

$$\widehat{\phi} = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} \\ A^T_{(\bar{S},S)} \end{bmatrix} A^{-1/2}_{(S,S)} \, \Psi \, \Lambda^{-1/2}$$

zadovoljava

$$\widehat{A} = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} & A_{(S,\bar{S})} \\ A^T_{(S,\bar{S})} & A^T_{(S,\bar{S})} \left(A_{(S,S)}\right)^{-1} A_{(S,\bar{S})} \end{bmatrix} = \widehat{\phi} \, \Lambda \, \widehat{\phi}^T.$$

Nadalje, takvu matricu $\widehat{\phi}$ moguće je konstruirati uz uvjet da su joj stupci ortogonalni, tj. da vrijedi

$$\widehat{\phi}^T \widehat{\phi} = I.$$

Efikasna konstrukcija Nyströmova preslikavanja

Konačno, u našem slučaju zahtijeva se i da su euklidske udaljenosti slika podataka iz skupa S po Nyströmovu preslikavanju $\widehat{\Phi}$ jednake euklidskim udaljenostima njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju $\widetilde{\Phi}$.
Zbog

$$\|u-v\|^2 = (u,u) - 2(u,v) + (v,v), \qquad \forall\ u,v \in \mathbb{R}^s,$$

za to je dovoljno da su skalarni produkti slika podataka iz skupa S po Nyströmovu preslikavanju $\widehat{\Phi}$ jednaki skalarnim produktima njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju $\widetilde{\Phi}$, tj, da vrijedi

$$\langle \widehat{\Phi}(x), \widehat{\Phi}(y) \rangle = \langle \widetilde{\Phi}(x), \widetilde{\Phi}(y) \rangle, \qquad \forall\ x,y \in S.$$

Efikasna konstrukcija Nyströmova preslikavanja

Tehnički gledano, matrice $\widehat{\phi}$ i Λ moraju zadovoljavati

$$A_{(S,S)}^{1/2}\,\psi\,\Lambda\,\psi^T\,A_{(S,S)}^{1/2} \;=\; A_{(S,S)}A_{(S,S)} + A_{(S,\bar{S})}A_{(S,\bar{S})}^T,$$

gdje lijeva strana predstavlja skalarne produkte Nyströmove aproksimacije

$$\widehat{\phi} \;=\; \begin{bmatrix} A_{(S,S)} \\ A_{(\bar{S},S)}^T \end{bmatrix} A_{(S,S)}^{-1/2}\,\Psi\,\Lambda^{-1/2}, \qquad \widehat{A} = \widehat{\phi}\,\Lambda\,\widehat{\phi}^T$$

na skupu S, a desna strana predstavlja skalarne produkte $\widetilde{A}\widetilde{A}^T$ parcijalnog difuzijskog preslikavanja na istom skupu.

Efikasna konstrukcija Nyströmova preslikavanja

Ova formulacija daje definiciju matrica $\widehat{\phi}$ i Λ, potrebnih za Nyströmovo preslikavanje, preko spektralne dekompozicije

$$C = \psi \Lambda \psi^T,$$

pri čemu je matrica C definirana kao

$$C := A_{(S,S)} + A_{(S,S)}^{-1/2} A_{(S,\bar{S})} A_{(S,\bar{S})}^T A_{(S,S)}^{-1/2}.$$

$\Longrightarrow$ matrica C je dimenzije $s \times s$, pa se računanje dekompozicije matrice $\widehat{A} = \widehat{\phi}\, \Lambda\, \widehat{\phi}^T$, $\widehat{\phi}^T \widehat{\phi} = I$, potrebne za ONM zasniva na računanju spektralne dekompozicije matrice dimenzije $s \times s$, pa je računalno efikasnije od računanja spektralne dekompozicije matrice A, koja je dimenzije $n \times n$

μIDM

Algoritam μIDM konstruira rječnik S dodavanjem točaka samo kada proširenje ne zadovoljava zadanu točnost. Za transformaciju $T_{\kappa,\ell}$ definira se

$$\beta = \left\| T_{\kappa,\ell} \circ \widehat{\Phi}_\kappa(x) - \widehat{\Phi}_\ell(x) \right\|.$$

Ako je $\beta > \mu/2$, nova točka ulazi u rječnik. Time se uz mali podskup S postiže μ-izometrična aproksimacija cijelog skupa.

Sažetak algoritma

1. Započni s rječnikom $S = \{x_1\}$ i izračunaj početno preslikavanje.
2. Za svaku novu točku x_{k+1} proširi rječnik na S' i izračunaj novo preslikavanje.
3. Izračunaj MTM transformaciju i pogrešku β.
4. Ako je $\beta > \mu/2$, zadrži novu točku u rječniku, inače je preskoči.

Pseudokôd

$S \leftarrow \{x_1\}$; $\widehat{\Phi} \leftarrow \mathrm{ONM}(S)$
for $k = 1$ **to** $n - 1$ **do**
    $S' \leftarrow S \cup \{x_{k+1}\}$; $\widehat{\Phi}' \leftarrow \mathrm{ONM}(S')$
    $T \leftarrow \mathrm{MTM}(\widehat{\Phi} \to \widehat{\Phi}')$
    $\beta \leftarrow \|T(\widehat{\Phi}(x_{k+1})) - \widehat{\Phi}'(x_{k+1})\|$
    if $\beta > \mu/2$ **then**
        $S \leftarrow S'$;
        $\widehat{\Phi} \leftarrow \widehat{\Phi}'$;
    else
        $S \leftarrow S$;
    end
end

Algorithm 1: μIDM — rječnik i ONM-proširenje

Rezultati iz literature

Eksperimenti su provedeni na sferi, *švicarskoj roladi* i Möbiusovoj vrpci (10 000 točaka, projekcija u $\mathbb{R}^{17}$). Dobivena je mala veličina rječnika uz vrlo malu pogrešku:

Sfera: $\epsilon = 1,\ \mu = 7.8 \cdot 10^{-6},\ |S| = 147,$

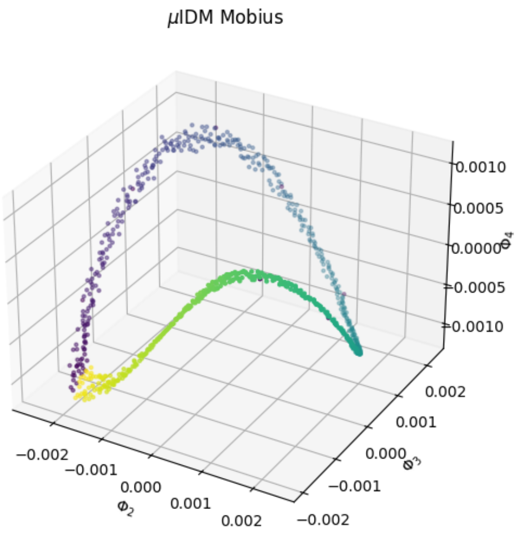
Švicarska rolada: $\epsilon = 70,\ \mu = 1.25 \cdot 10^{-4},\ |S| = 236,$

Möbiusova vrpca: $\epsilon = 1,\ \mu = 7.8 \cdot 10^{-6},\ |S| = 85.$

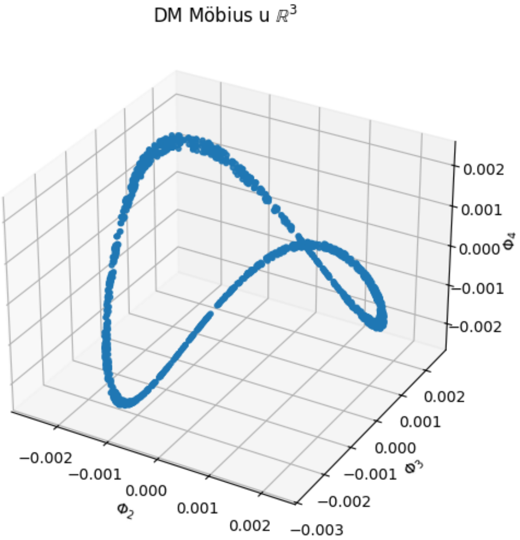
Rezultati vlastite implementacije

Za 750 točaka dobiveno je:

$$\text{Möbiusova vrpca: } \epsilon = 1,\ \mu = 2.8 \cdot 10^{-3},\ |S| = 9,$$
$$\text{Sfera: } \epsilon = 3,\ \mu = 2.79 \cdot 10^{-3},\ |S| = 261.$$

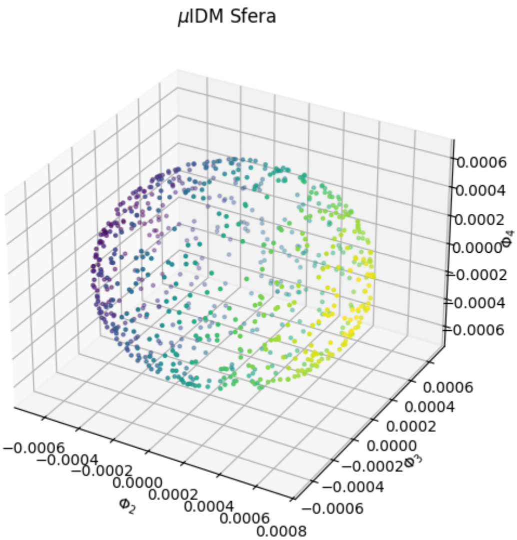


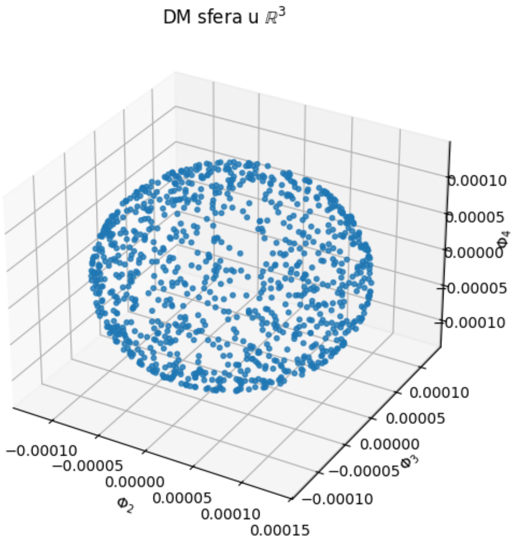
μIDM Mobius
0.0010
0.0005
0.0000
−0.0005
−0.0010
Φ_4
0.002
0.001
0.000
−0.001
−0.002
Φ_3
−0.002
−0.001
0.000
0.001
0.002
Φ_2



DM Möbius u $\mathbb{R}^3$
0.002
0.001
0.000
−0.001
−0.002
Φ_4
0.002
0.001
0.000
−0.001
−0.002
−0.003
Φ_3
−0.002
−0.001
0.000
0.001
0.002
Φ_2

Sfera


μIDM Sfera
0.0006
0.0004
0.0002
0.0000
−0.0002
−0.0004
−0.0006
Φ4
0.0006
0.0004
0.0002
0.0000
−0.0002
−0.0004
−0.0006
Φ3
−0.0006
−0.0004
−0.0002
0.0000
0.0002
0.0004
0.0006
0.0008
Φ2


DM sfera u $\mathbb{R}^3$
0.00010
0.00005
0.00000
−0.00005
−0.00010
Φ4
0.00010
0.00005
0.00000
−0.00005
−0.00010
Φ3
−0.00010
−0.00005
0.00000
0.00005
0.00010
0.00015
Φ2

Zaključak

μIDM omogućuje skalabilno difuzijsko preslikavanje velikih skupova podataka. Rječnik i ortogonalno Nyströmovo proširenje čuvaju difuzijsku geometriju uz kontroliranu pogrešku μ, a računalna složenost ovisi o veličini rječnika, a ne o broju svih točaka.