

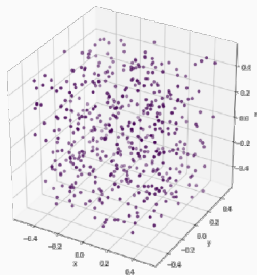
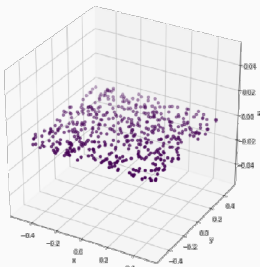
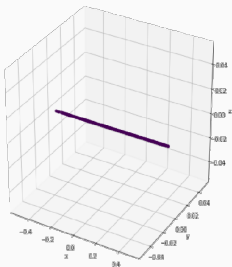
Методы понижения размерности данных

Поглазов Никита

2024

Введение

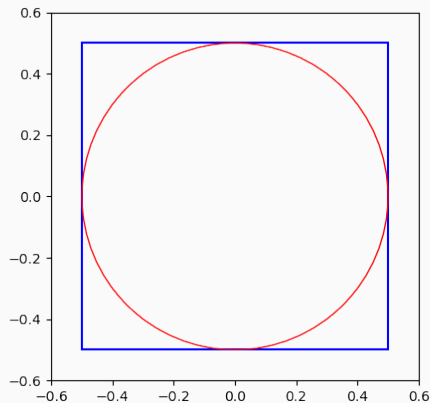
Проклятие размерности: данные высокой размерности сложны для анализа, требуют много вычислительных ресурсов и часто содержат шум.



Мотивация

Что такое "проклятие размерности"?

$$S_{square} = 1 \quad S_{circle} = \pi * (0.5)^2 = \frac{\pi}{4} \approx 0.79$$

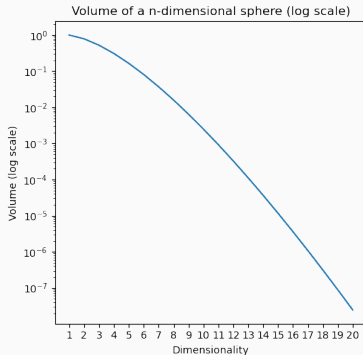
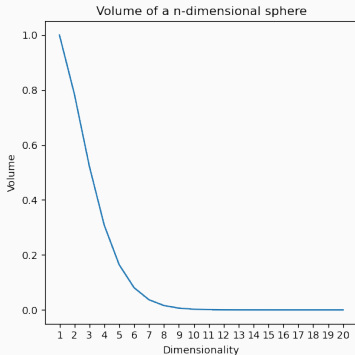


Гиперсфера и гиперкуб

- Объем гиперсферы стремится к нулю при росте размерности:

$$V_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} R^n$$

- Диагональ гиперкуба увеличивается как \sqrt{n} .



Влияние на метрические модели

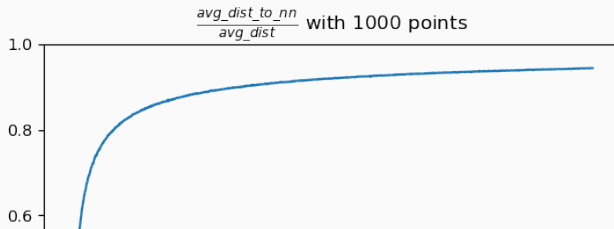
- Манхэттенское расстояние:

$$d(x^{(i)}, x^{(j)}) = \sum_{k=1}^n |x_k^{(i)} - x_k^{(j)}|$$

- Средние расстояния между точками становятся близкими:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{d(x^{(i)}, x^{(j)})}{n} = \mu$$

- Сохраняется и для L_2 нормы.



Линейная регрессия и мультиколлинеарность

- Решение задачи MSE:

$$(X^T X) \hat{\beta} = X^T y$$

- Матричная ковариация:

$$\text{Cov}(X) = \frac{1}{k-1} X^T X$$

- Высокая корреляция между признаками \Rightarrow нестабильные веса, переобучение.

Влияние на "деревянные" модели

- Сложность выбора оптимального разделения при высокой размерности.
- Деревья склонны к переобучению из-за случайных разбиений.
- **Workaround:** *Random Subspace Method* (Ho)

Влияние на глубокие нейронные сети

- Сверточные сети (*CNN*) используют локальные взаимосвязи.
- *LSTM* моделируют временные зависимости, игнорируя пространственные.
- Трансформеры извлекают только значимые зависимости.
- Проблемы: обучение на шуме, сложность оптимизации функционала потерь.

Общее влияние "проклятия размерности"

- Увеличение времени обучения моделей.
- Сложность интерпретации табличных данных.
- Вероятность обучения на шумовых признаках \Rightarrow переобучение.

Обзор и классификация методов

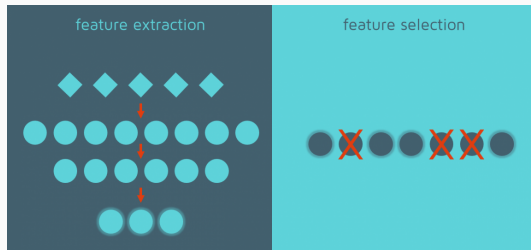
Два подхода к понижению размерности

Отбор признаков:

- Выбор подмножества исходных признаков.
- Сохранение информации без преобразования данных.

Преобразование признаков:

- Трансформация данных в новое пространство меньшей размерности.
- Сохраняет наиболее значимые свойства данных.

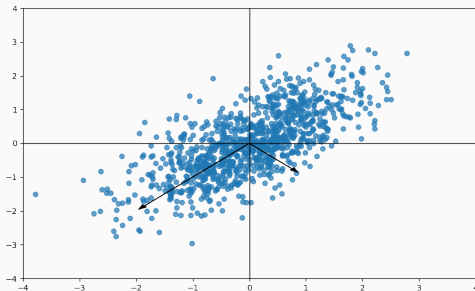


Principal Component Analysis (PCA)

Цель: Сохранить максимальную дисперсию данных.

Пример применения:

- Визуализация данных высокой размерности (например, геномика).
- Уменьшение размерности для кластеризации образцов.



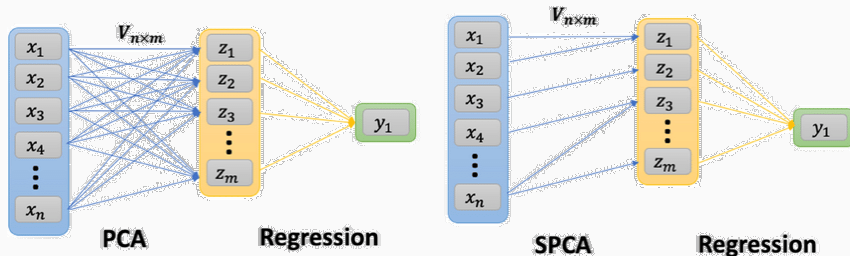
Sparse PCA (SPCA)

Отличие от PCA:

- Ограничение на разреженность главных компонент.
- Уменьшает сложность интерпретации данных.

Применение:

- Анализ данных с множеством нерелевантных признаков (например, финансовые индикаторы).

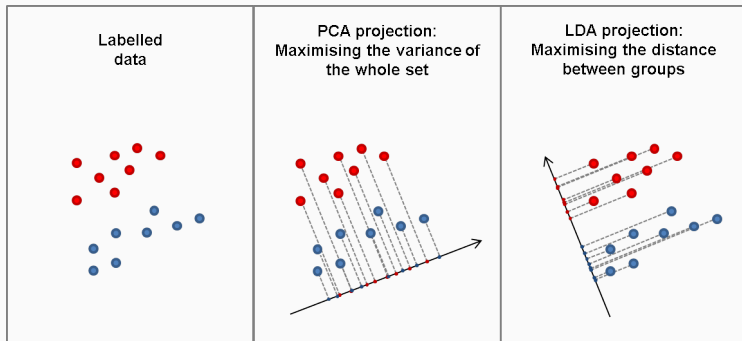


Linear Discriminant Analysis (LDA)

Цель: Максимизация различий между классами.

Пример применения:

- Распознавание лиц в биометрии.
- Классификация текстов по категориям.



Canonical Correlation Analysis (CCA)

Цель: Найти коррелирующие компоненты в двух наборах данных.

Пример применения:

- Связь между анкетными данными и биометрией.
- Исследование двух источников данных для выявления зависимостей.

Ключевая идея: *Kernel Trick* для проецирования в нелинейное пространство.

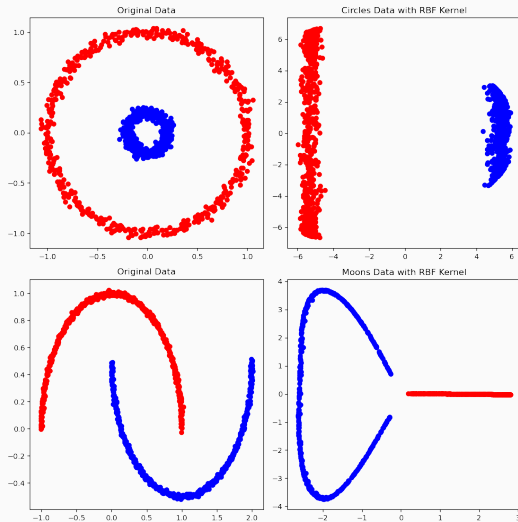
Пример ядерной функции (гауссовское ядро):

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp \left(-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2} \right)$$

Пример применения:

- Обнаружение сложных текстур на изображениях.
- Биоинформатика: анализ активности молекул.

Kernel PCA (KPCA)



Алгоритм визуализации (!) данных высокой размерности.

Цель: Локальное сохранение расстояний между точками.

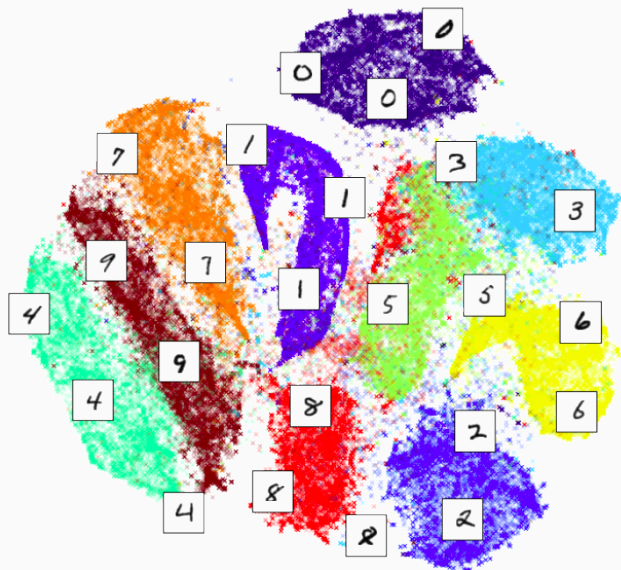
Основная идея:

- Перевод данных в вероятностное представление.
- Минимизация расстояния Кульбака-Лейблера (KL-дивергенция).

Пример применения:

- Визуализация эмбеддингов слов или изображений.
- Кластеризация геномных данных.

t-SNE



UMAP (*Uniform Manifold Approximation and Projection*)

Цель: Сохранение как локальных, так и глобальных структур данных.

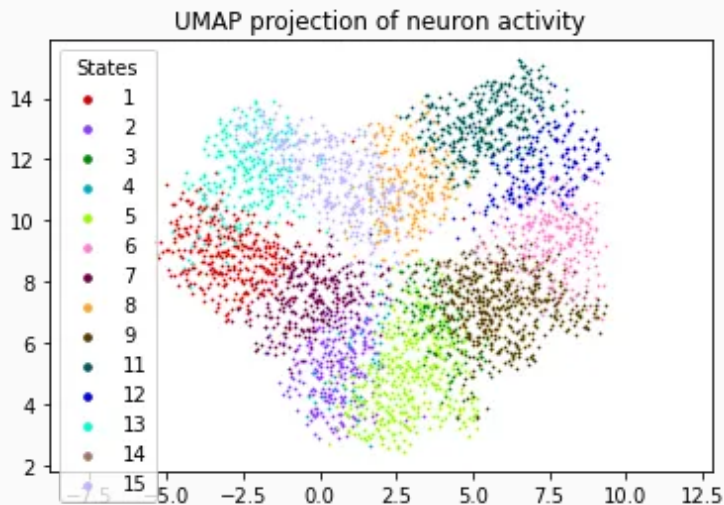
Основные этапы метода:

- Построение графа соседей данных в исходном пространстве.
- Оптимизация аппроксимации графа в пространстве меньшей размерности.

Пример применения:

- Визуализация паттернов активности мозга.
- Анализ биоинформационных данных.

UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection)



AutoEncoders (AEs)

Цель: Нахождение компактных нелинейных представлений данных.

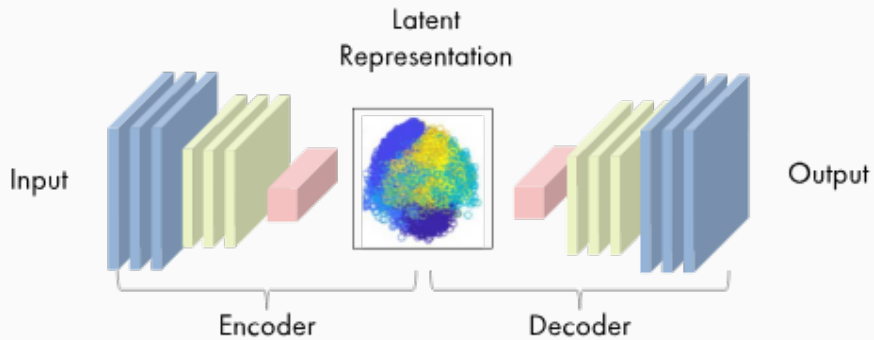
Основная структура:

- Кодировщик (encoder): преобразует входные данные в компактное представление.
- Декодировщик (decoder): восстанавливает данные из сжатого представления.

Пример применения:

- Удаление шума с изображений.
- Выделение особенностей для классификации.

AutoEncoders (AEs)



Variational AutoEncoders (VAEs)

Расширение автоэнкодеров: генерация данных на основе латентного пространства.

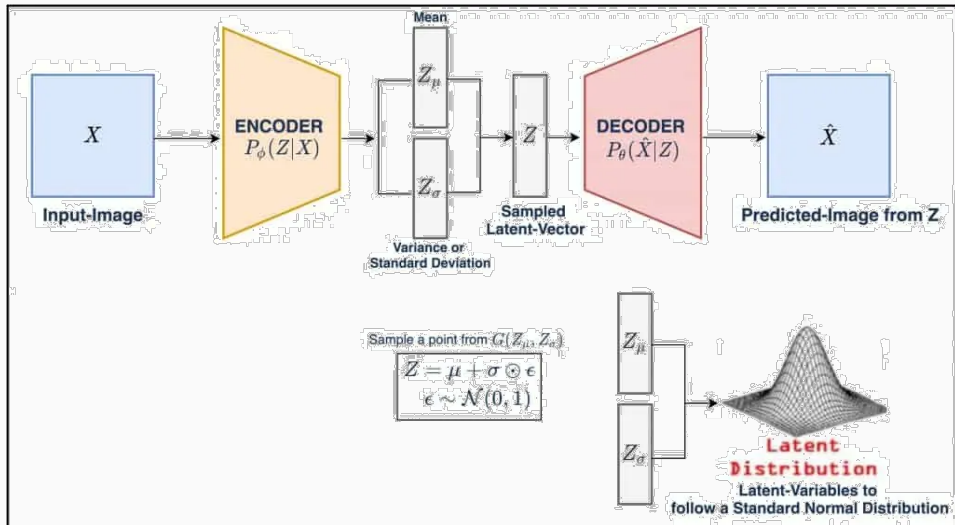
Основная идея:

- Представление латентного пространства в виде вероятностного распределения.

Пример применения:

- Генерация новых молекул с заданными свойствами.
- Создание искусственных изображений.

Variational AutoEncoders (VAEs)



Principal Component Analysis (PCA)

Постановка задачи (1)

Дан неразмеченный датасет $X = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$, где $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D$. Предполагаем центрированность данных: $\mathbb{E}[\mathbf{x}_i] = 0$.

Матрица ковариации данных:

$$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T.$$

Переход в новое пространство меньшей размерности (сжатие):

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{B}^T \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^M, \quad M < D,$$

Постановка задачи (2)

Базис $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_M] \in \mathbb{R}^{D \times M}$ удовлетворяет:

$$\mathbf{b}_i^T \mathbf{b}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

Восстановление данных:

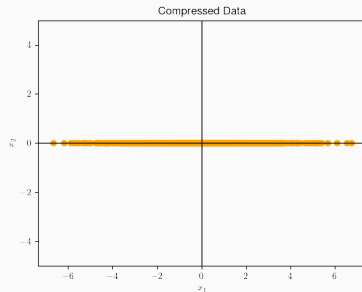
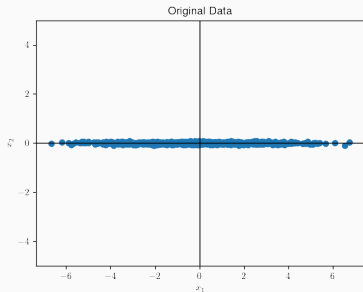
$$\tilde{\mathbf{x}}_i = \mathbf{B} \mathbf{z}_i.$$

Пример: 2D \rightarrow 1D

Исходный вектор: $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^2$, $\mathbf{x}_i = \begin{bmatrix} 5 \\ \frac{1}{100} \end{bmatrix}$. Выбираем базис $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$.

Шаги:

- Координаты в новом базисе: $\mathbf{z}_i = \mathbf{B}^T \mathbf{x}_i = 5$.
- Восстановленный вектор: $\tilde{\mathbf{x}}_i = \mathbf{B} \mathbf{z}_i = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}$.



Нахождение направления максимальной дисперсии (1)

Цель: Найти направление \mathbf{b}_1 , вдоль которого дисперсия данных максимальна.

Дисперсия вдоль первой координаты в новом пространстве:

$$\begin{aligned} V_1 := \mathbb{D}[z_1] &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_{1i}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{b}_1^T \mathbf{x}_i)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{b}_1^T x_i x_i^T \mathbf{b}_1) \\ &= \mathbf{b}_1^T \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i x_i^T \right) \mathbf{b}_1 = \mathbf{b}_1^T \Sigma \mathbf{b}_1. \end{aligned}$$

Нахождение направления максимальной дисперсии (2)

Задача условной оптимизации:

$$\max_{\mathbf{b}_1} \mathbf{b}_1^T \Sigma \mathbf{b}_1, \quad \text{s.t. } \mathbf{b}_1^T \mathbf{b}_1 = 1.$$

Функция Лагранжа: $\mathcal{L}(\mathbf{b}_1, \lambda) = \mathbf{b}_1^T \Sigma \mathbf{b}_1 - \lambda(\mathbf{b}_1^T \mathbf{b}_1 - 1)$.

Частные производные по \mathbf{b}_1 и λ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}_1} &= 2\Sigma \mathbf{b}_1 - 2\lambda_1 \mathbf{b}_1 = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_1} &= -\mathbf{b}_1^T \mathbf{b}_1 + 1 = 0. \end{aligned}$$

Собственные векторы и значения

Получаем:

$$\begin{aligned}\Sigma \mathbf{b}_1 &= \lambda_1 \mathbf{b}_1, \\ V_1 &= \lambda_1.\end{aligned}$$

Теперь можем переписать дисперсию V_1 как:

$$V_1 = \mathbf{b}_1^T \Sigma \mathbf{b}_1 = \lambda_1 \mathbf{b}_1^T \mathbf{b}_1 = \lambda_1.$$

Интерпретация:

- \mathbf{b}_1 : первое направление главной компоненты.
- λ_1 : дисперсия вдоль направления \mathbf{b}_1 .

Остальные компоненты (1)

Для m -й компоненты:

$$\begin{aligned} & \max_{\mathbf{b}_m} \mathbf{b}_m^T \Sigma \mathbf{b}_m, \\ & \text{s.t. } \mathbf{b}_m^T \mathbf{b}_m = 1, \quad \mathbf{b}_m^T \mathbf{b}_i = 0, \forall i < m. \end{aligned}$$

Функция Лагранжа:

$$\mathcal{L}(\mathbf{b}_m, \lambda_m, \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{b}_m^T \Sigma \mathbf{b}_m - \lambda_m (\mathbf{b}_m^T \mathbf{b}_m - 1) - \sum_{i=1}^{m-1} \mu_i \mathbf{b}_m^T \mathbf{b}_i.$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}_m} &= 2\Sigma \mathbf{b}_m - 2\lambda_m \mathbf{b}_m - \sum_{i=1}^{m-1} \mu_i \mathbf{b}_i = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_m} &= -\mathbf{b}_m^T \mathbf{b}_m + 1 = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mu_i} = -\mathbf{b}_m^T \mathbf{b}_i = 0, \forall i < m. \end{aligned}$$

Домножим первое уравнение на \mathbf{b}_j^T , $j < m$ слева:

Остальные компоненты (2)

$$2\mathbf{b}_j^T \Sigma \mathbf{b}_m - 2\lambda_m \mathbf{b}_j^T \mathbf{b}_m - \sum_{i=1}^{m-1} \mu_i \mathbf{b}_j^T \mathbf{b}_i = 0,$$

поскольку $\mathbf{b}_j^T \mathbf{b}_i = \delta_{ji}$:

$$2\mathbf{b}_j^T \Sigma \mathbf{b}_m - \mu_j = 0.$$

Σ симметрична, поэтому

$$\mathbf{b}_j^T \Sigma \mathbf{b}_m = \langle (\mathbf{b}_j^T \Sigma)^T, \mathbf{b}_m \rangle = \langle \Sigma \mathbf{b}_j, \mathbf{b}_m \rangle = \langle \lambda_j \mathbf{b}_j, \mathbf{b}_m \rangle = \lambda_j \langle \mathbf{b}_j, \mathbf{b}_m \rangle = 0.$$

Тогда $\mu_j = 0$. и, аналогично, $\forall j < m \quad \mu_j = 0$

Остальные компоненты (3)

Таким образом:

$$\Sigma \mathbf{b}_m = \lambda_m \mathbf{b}_m,$$

Вновь, \mathbf{b}_m - собственный вектор матрицы ковариации Σ , а λ_m - собственное значение.

Общая дисперсия: $\sum_{i=1}^N \lambda_i$.

Объясненная дисперсия первых m главных компонент: $\sum_{i=1}^m \lambda_i$.

Доля объясненной дисперсии: $\frac{\sum_{i=1}^m \lambda_i}{\sum_{i=1}^N \lambda_i}$.

Формулы:

$$\begin{aligned}\mathbf{Z} &= \mathbf{B}^T \mathbf{X}, \\ \tilde{\mathbf{X}} &= \mathbf{B} \mathbf{Z}, \\ \Sigma &= \frac{1}{N} \mathbf{X} \mathbf{X}^T.\end{aligned}$$

Примечание: строки \mathbf{X} — признаки, столбцы — объекты.



Kernel PCA (KPCA)

Постановка задачи (1)

Дан центрированный неразмеченный датасет $X = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D$.

Задано:

- Преобразование $\phi : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{H}$, где \mathbb{H} — гильбертово пространство.
- Функция (ядро) $k : \mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R} : \quad k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}) \rangle_{\mathbb{H}}$.

Цель: Найти линейное подпространство в \mathbb{H} размерности P , минимизирующее расстояние между x_i и их проекцией.

Постановка задачи (2)

Свойства ядерных функций:

- **Утверждение:** по произвольной функции ϕ можно построить ядро k - положительно определенная функция.
- **Теорема Moore-Aronszajn:** По положительно определённом ядру k можно построить ϕ и пространство \mathbb{H} .
- Матрица Грама $\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{N \times N}$:

$$K_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

Пространство: Пусть $\mathbb{H} = \mathbb{R}^H$, где $H \gg D$ (для конечномерного случая).

Наивный подход

Шаги:

1. Вычислить $\{\phi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$.
2. Применить PCA к $\{\phi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$.

Проблемы:

- Вычисление $\phi(\mathbf{x}_i)$ дорого.
- ϕ может быть неизвестным.
- Ковариационная матрица размера $H \times H$, где $H \gg D$.

Kernel Trick (1)

Подход: Составим из $\phi(\mathbf{x}_i)$ матрицу Φ ($N \times H$). Матрица ковариации:

$$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}_i)^T = \frac{1}{N} \Phi^T \Phi.$$

Главные компоненты $\omega_p \in \mathbb{H}$:

$$\Sigma \omega_p = \lambda_p \omega_p \quad \text{для } p = 1, 2, \dots, P.$$

Kernel Trick (2)

Подставим Σ :

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}_i)^T \omega_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i) \langle \phi(\mathbf{x}_i), \omega_p \rangle_{\mathbb{H}} = \lambda_p \omega_p.$$

Представление компонент:

$$\omega_p = \sum_{j=1}^N \alpha_{p,j} \phi(\mathbf{x}_j), \quad \alpha_{p,j} = \langle \phi(\mathbf{x}_j), \omega_p \rangle_{\mathbb{H}}.$$

Kernel Trick (3)

Подставим это в уравнение для ω_p :

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i) \langle \phi(\mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^N \alpha_{p,j} \phi(\mathbf{x}_j) \rangle_{\mathbb{H}} = \lambda_p \sum_{i=1}^N \alpha_{p,i} \phi(\mathbf{x}_i),$$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}_i)^T \sum_{j=1}^N \phi(\mathbf{x}_j) \alpha_{p,j} = \lambda_p \sum_{j=1}^N \alpha_{p,j} \phi(\mathbf{x}_j),$$

$$\frac{1}{N} \Phi^T \Phi \Phi^T \boldsymbol{\alpha}_p = \lambda_p \Phi^T \boldsymbol{\alpha}_p,$$

$$\Phi^T (\Phi \Phi^T \boldsymbol{\alpha}_p - N \lambda_p \boldsymbol{\alpha}_p) = 0$$

$$\mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}_p = N \lambda_p \boldsymbol{\alpha}_p, \quad \mathbf{K} = \Phi \Phi^T, \quad K_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

Проекции на главные компоненты

Проекции на главные компоненты вычисляются **даже без знания ϕ** :

$$\begin{aligned}\mathbf{z}_{ij} &= \langle \phi(\mathbf{x}_i), \omega_j \rangle_{\mathbb{H}} = \boldsymbol{\omega}_j^T \phi(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^N \alpha_{j,k} \phi(\mathbf{x}_k)^T \phi(\mathbf{x}_i) \\ &= \sum_{k=1}^N \alpha_{j,k} k(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^N \alpha_{j,k} \mathbf{K}_{ki} = \sum_{k=1}^N \alpha_{j,k} \mathbf{K}_{ik} = \mathbf{K}_i \boldsymbol{\alpha}_j.\end{aligned}$$

$$\mathbf{Z} = \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}.$$

Центрирование образов (1)

Проблема: Образы $\phi(\mathbf{x}_i)$ могут быть нецентрированными, даже если \mathbf{x}_i центрированы.

Коррекция:

$$\tilde{\phi}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{x}_i).$$

Центрирование образов (2)

Обновление ядра:

$$\begin{aligned}\tilde{k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = & k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) - k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y})) \\ & + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).\end{aligned}$$

Центрированная матрица:

$$\tilde{\mathbf{K}} = \left(\mathbf{E} - \frac{1}{N} \mathbf{1} \mathbf{1}^T \right) \mathbf{K} \left(\mathbf{E} - \frac{1}{N} \mathbf{1} \mathbf{1}^T \right),$$

где $\mathbf{1}$ — вектор из единиц.

Наиболее популярное ядро: Гауссово (RBF):

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp \left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2}{2\sigma^2} \right) = \exp \left(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 \right) .$$

Альтернативные ядра:

- Полиномиальное: $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\gamma \mathbf{x}^T \mathbf{y} + r)^d$.
- Сигмоидальное: $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \tanh(\gamma \mathbf{x}^T \mathbf{y} + r)$.
- Линейное: $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{x}^T \mathbf{y}$.



AutoEncoders (AEs)

Постановка задачи

Дан неразмеченный датасет $X = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$, где $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D$.

Цель: Найти сжатое представление $\mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^M$, $M < D$, такое что восстановленные данные $\tilde{\mathbf{x}}_i$ близки к исходным \mathbf{x}_i .

Подход: Использование нелинейных преобразований, реализованных нейронной сетью.

Архитектура автоэнкодера (1)

Encoder: Нелинейное отображение $f_{\theta} : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^M$:

$$\mathbf{z} = f_{\theta}(\mathbf{x}),$$

где:

$$f_{\theta} = f_L \circ f_{L-1} \circ \dots \circ f_1, \quad f_i = \sigma_{Ei}(\mathbf{W}_{Ei}\mathbf{z}_{i-1} + \mathbf{b}_{Ei}).$$

Decoder: Восстановление $g_{\phi} : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^D$:

$$\tilde{\mathbf{x}} = g_{\phi}(\mathbf{z}),$$

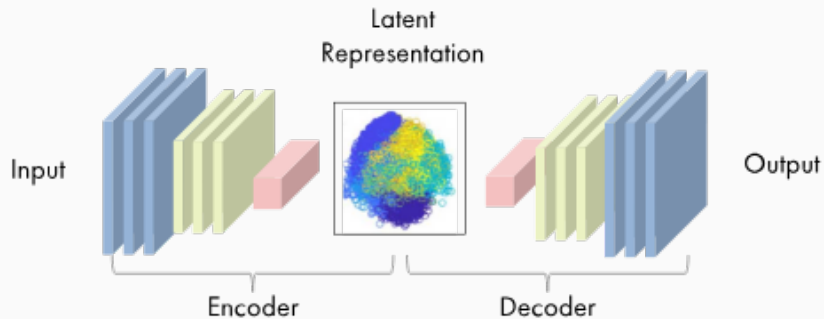
где:

$$g_{\phi} = g_L \circ g_{L-1} \circ \dots \circ g_1, \quad g_i = \sigma_{Di}(\mathbf{W}_{Di}\mathbf{z}_{i-1} + \mathbf{b}_{Di}).$$

Полная архитектура:

$$\begin{aligned} \mathbf{z} &= f_{\theta}(\mathbf{x}), \\ \tilde{\mathbf{x}} &= g_{\phi}(\mathbf{z}). \end{aligned}$$

Архитектура автоэнкодера (2)



Функция потерь: ошибка реконструкции (*reconstruction error*):

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{x}_i - \tilde{\mathbf{x}}_i\|_2^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{x}_i - g_{\boldsymbol{\phi}}(f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}_i))\|_2^2.$$

Альтернативная функция потерь: бинарная кросс-энтропия для выхода в $[0, 1]^D$:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^D (x_{ij} \log \tilde{x}_{ij} + (1 - x_{ij}) \log(1 - \tilde{x}_{ij})).$$

Ошибка реконструкции в PCA:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{x}_i - \tilde{\mathbf{x}}_i\|_2^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{x}_i - \mathbf{B}\mathbf{B}^T \mathbf{x}_i\|_2^2.$$

Если:

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{x}) = \mathbf{W}_E \mathbf{x}, \quad g_{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{z}) = \mathbf{W}_D \mathbf{z},$$

то:

$$\mathbf{W}_E = \mathbf{B}^T, \quad \mathbf{W}_D = \mathbf{B},$$

и автоэнкодер эквивалентен PCA.



Variational AutoEncoders (VAEs)

Постановка задачи (1)

Дан неразмеченный датасет $X = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$, где $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D$.

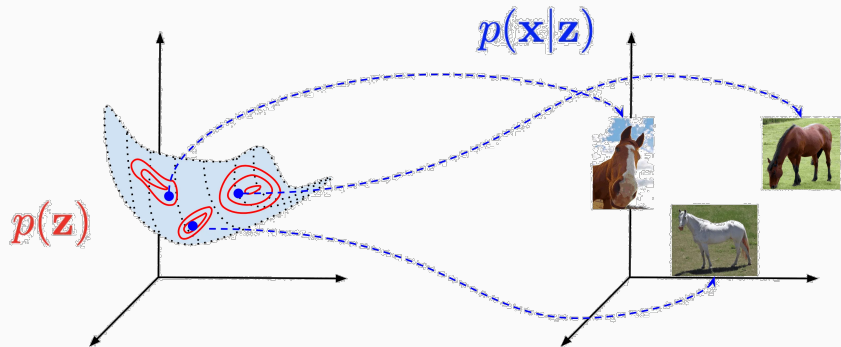
Цель:

- Обучить автоэнкодер так, чтобы его скрытое представление $\mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^M$ было распределено по заданному распределению.
- Задать латентное распределение: $p(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \mathbf{0}, \mathbf{E})$.

Построение генеративной модели:

- Способность генерировать объекты $p(\mathbf{z})$, близкие к объектам обучающей выборки X .

Постановка задачи (2)



Интуиция (1)

Идея:

- $f_{\theta}(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{x}} = (\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}}^2)$ — параметры нормального распределения.
- $\mathbf{z} \sim p(\mathbf{z} \mid \psi_{\mathbf{x}}) = \mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}}^2)$.
- $\tilde{\mathbf{x}} = g_{\phi}(\mathbf{z}) \sim p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z})$.

Параметры:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}} &= [\mu_{\mathbf{x}1} \quad \mu_{\mathbf{x}2} \quad \dots \quad \mu_{\mathbf{x}M}] , \\ \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}}^2 &= \text{diag} \left([\sigma_{\mathbf{x}1}^2 \quad \sigma_{\mathbf{x}2}^2 \quad \dots \quad \sigma_{\mathbf{x}M}^2] \right) .\end{aligned}$$

Проблемы:

1. **Проблема 1:** модель стремится к $\sigma_x^2 = 0$, что превращает VAE в АЕ.
 - **Решение:** добавить регуляризационный член (какой?):
$$\mathcal{L}(\theta, \phi) = L_{\text{rec}} + \alpha L_{\text{reg}}.$$
2. **Проблема 2:** сэмплирование не дифференцируемо.

Правдоподобие $p(\mathbf{x})$

Совместное распределение:

$$p_{\phi}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = p(\mathbf{x}, \mathbf{z} \mid \phi).$$

Правдоподобие данных:

$$L(\phi) = \prod_{i=1}^N p_{\phi}(\mathbf{x}_i),$$

$$\log L(\phi) = \sum_{i=1}^N \log p_{\phi}(\mathbf{x}_i).$$

Цель: Максимизация правдоподобия:

$$p_{\phi}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{z}} p_{\phi}(\mathbf{x}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} \rightarrow \max_{\phi \in \Phi}.$$

Аппроксимация $p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x})$ (1)

Теорема Байеса:

$$p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}, \mathbf{z})}{p(\mathbf{x})} = \frac{p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z})p(\mathbf{z})}{p(\mathbf{x})}.$$

Распределения:

- $p(\mathbf{x})$: априорное распределение данных.
- $p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x})$: распределение энкодера.
- $p(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \mathbf{0}, \mathbf{E})$: априорное распределение латентного пространства.
- $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z}) (= \mathcal{N}(\mathbf{x} \mid g_{\phi}(\mathbf{z}), c\mathbf{I}))$: распределение декодера.

Аппроксимация $p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x})$ (2)

Проблема: $p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x})$ имеет сложную форму:

$$p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x}) = \frac{\mathcal{N}(\mathbf{x} \mid g_{\phi}(\mathbf{z}), c\mathbf{I})\mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \mathbf{0}, \mathbf{E})}{p(\mathbf{x})}.$$

Workaround: Аппроксимация через простое распределение $q(\mathbf{z})$:

$$p(\mathbf{z} \mid \mathbf{x}) \approx q(\mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}}^2).$$

Вариационное приближение (1)

Цель: Максимизировать правдоподобие $p(\mathbf{x})$:

$$\begin{aligned}\log p(\mathbf{x}) &= \log \int_{\mathbf{z}} p(\mathbf{x}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} = \log \int_{\mathbf{z}} p(\mathbf{x} | \mathbf{z}) p(\mathbf{z}) d\mathbf{z} \\ &= \log \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} \left[\frac{p(\mathbf{z}) p(\mathbf{x} | \mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} \right].\end{aligned}$$

Неравенства Йенсена:

$$\begin{aligned}g(\mathbb{E}[\xi]) &\leq \mathbb{E}[g(\xi)], & g(x) &\text{— вогнутая функция,} \\ g(\mathbb{E}[\xi]) &\geq \mathbb{E}[g(\xi)], & g(x) &\text{— выпуклая функция.}\end{aligned}$$

Вариационное приближение (2)

Применим к \log :

$$\begin{aligned}\log p(\mathbf{x}) &= \log \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} \left[\frac{p(\mathbf{z})p(\mathbf{x} | \mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} \right] \geq \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} \left[\log \frac{p(\mathbf{z})p(\mathbf{x} | \mathbf{z})}{q(\mathbf{z})} \right] \\ &= \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} [\log p(\mathbf{x} | \mathbf{z})] - \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} \left[\log \frac{q(\mathbf{z})}{p(\mathbf{z})} \right] \\ &= \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} [\log p(\mathbf{x} | \mathbf{z})] - \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})),\end{aligned}$$

где KL — дивергенция Кульбака-Лейблера.

Итог: Нижняя граница на $\log p(\mathbf{x})$ (Evidence Lower Bound, *ELBO*):

$$\log p(\mathbf{x}) \geq \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} [\log p(\mathbf{x} | \mathbf{z})] - \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})) \rightarrow \max_{q(\mathbf{z})}.$$

Распределение $p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z})$

$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z}) = \mathcal{N}(\mathbf{x} \mid g_\phi(\mathbf{z}), c\mathbf{I})$, $c \neq 0$, поэтому матрица ковариации невырождена.

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z}) &= \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |c\mathbf{I}|^{1/2}} \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - g_\phi(\mathbf{z}))^T (c\mathbf{I})^{-1} (\mathbf{x} - g_\phi(\mathbf{z})) \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{D/2} c^{D/2}} \exp \left(-\frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g_\phi(\mathbf{z})\|_2^2 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \log(p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z})) &= -\frac{D}{2} \log(2\pi) - \frac{D}{2} \log(c) - \frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g_\phi(\mathbf{z})\|_2^2 \\ &= \text{const} - \frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g_\phi(\mathbf{z})\|_2^2. \end{aligned}$$

Оптимизационная задача:

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} [\log p(\mathbf{x} \mid \mathbf{z})] - \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})) \\ &= -\mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} \left[\frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g_{\phi}(\mathbf{z})\|_2^2 \right] - \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})) \rightarrow \max_{q(\mathbf{z})}. \end{aligned}$$

Эквивалентная формулировка:

$$\mathbb{E}_{q(\mathbf{z})} \left[\frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g_{\phi}(\mathbf{z})\|_2^2 \right] + \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})) \rightarrow \min_{q(\mathbf{z})}.$$

Получили то, чего и хотели:

$$\begin{aligned}L_{\text{rec}} &= \frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g\phi(\mathbf{z})\|_2^2, \\L_{\text{reg}} &= \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})).\end{aligned}$$

Итог: Баланс между реконструкцией данных и отклонением от априорного распределения в латентном пространстве.

Вычисление $L_{\text{reg}}(1)$

$$\begin{aligned} \text{KL}(q(\mathbf{z}) \parallel p(\mathbf{z})) &= \text{KL}(\mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\sigma}_{\mathbf{x}}^2) \parallel \mathcal{N}(\mathbf{z} \mid \mathbf{0}, \mathbf{E})) \\ &= \text{KL}\left(\prod_{i=1}^M \mathcal{N}(z_i \mid \mu_{\mathbf{x}i}, \sigma_{\mathbf{x}i}^2) \parallel \prod_{i=1}^M \mathcal{N}(z_i \mid 0, 1)\right) = \text{KL}\left(\prod_{i=1}^M q_i(\mathbf{z}_i) \parallel \prod_{i=1}^M p_i(\mathbf{z}_i)\right) \\ &= \int_{\mathbf{z}} \prod_{i=1}^M q_i(\mathbf{z}_i) \log \frac{\prod_{i=1}^M q_i(\mathbf{z}_i)}{\prod_{i=1}^M p_i(\mathbf{z}_i)} d\mathbf{z} = \int_{\mathbf{z}} \prod_{i=1}^M q_i(\mathbf{z}_i) \left(\sum_{i=1}^M \log \frac{q_i(\mathbf{z}_i)}{p_i(\mathbf{z}_i)}\right) d\mathbf{z} \\ &= \sum_{j=1}^M \int_{\mathbf{z}} \log \frac{q_j(\mathbf{z}_j)}{p_j(\mathbf{z}_j)} \prod_{i=1}^M q_i(\mathbf{z}_i) d\mathbf{z}_1 \dots d\mathbf{z}_M \\ &= \sum_{j=1}^M \left(\left(\int_{\mathbf{z}_j} \log \frac{q_j(\mathbf{z}_j)}{p_j(\mathbf{z}_j)} q_j(\mathbf{z}_j) d\mathbf{z}_j \right) \prod_{i \neq j} \int_{\mathbf{z}_i} q_i(\mathbf{z}_i) d\mathbf{z}_i \right) = \dots \end{aligned}$$

Вычисление L_{reg} (2)

$$= \sum_{j=1}^M \left(\int_{\mathbf{z}_j} \log \frac{q_j(\mathbf{z}_j)}{p_j(\mathbf{z}_j)} q_j(\mathbf{z}_j) d\mathbf{z}_j \right) = \sum_{j=1}^M \text{KL}(q_j(\mathbf{z}_j) \parallel p_j(\mathbf{z}_j))$$

Для каждой компоненты:

$$\begin{aligned} \text{KL}(q_j(\mathbf{z}_j) \parallel p_j(\mathbf{z}_j)) &= \int_{z_j} \mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\mathbf{x}j}, \sigma_{\mathbf{x}j}^2) \log \frac{\mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\mathbf{x}j}, \sigma_{\mathbf{x}j}^2)}{\mathcal{N}(z_j \mid 0, 1)} dz_j. \\ &= \mathbb{E}_{q_j(z_j)} [\log \mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\mathbf{x}j}, \sigma_{\mathbf{x}j}^2) - \log \mathcal{N}(z_j \mid 0, 1)] . \end{aligned}$$

Распределение \mathcal{N} :

$$\begin{aligned} \log \mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\mathbf{x}j}, \sigma_{\mathbf{x}j}^2) &= -\frac{1}{2} \log(2\pi\sigma_{\mathbf{x}j}^2) - \frac{1}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} (z_j - \mu_{\mathbf{x}j})^2, \\ \log \mathcal{N}(z_j \mid 0, 1) &= -\frac{1}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} z_j^2. \end{aligned}$$

Вычисление L_{reg} (3)

Разница логарифмов:

$$\log \mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\mathbf{x}j}, \sigma_{\mathbf{x}j}^2) - \log \mathcal{N}(z_j \mid 0, 1) = -\frac{1}{2} \log(\sigma_{\mathbf{x}j}^2) - \frac{1}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} (z_j - \mu_{\mathbf{x}j})^2 + \frac{1}{2} z_j^2.$$

Итоговая формула:

$$\begin{aligned} \text{KL}(q_j(\mathbf{z}_j) \parallel p_j(\mathbf{z}_j)) &= \mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[-\frac{1}{2} \log(\sigma_{\mathbf{x}j}^2) - \frac{1}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} (z_j - \mu_{\mathbf{x}j})^2 + \frac{1}{2} z_j^2 \right] \\ &= \mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[-\left(\frac{1}{2} \log(\sigma_{\mathbf{x}j}^2) + \frac{\mu_{\mathbf{x}j}^2}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} \right) z_j^2 + \frac{\mu_{\mathbf{x}j}}{\sigma_{\mathbf{x}j}^2} z_j \right] \\ &= -\left(\frac{1}{2} \log(\sigma_{\mathbf{x}j}^2) + \frac{\mu_{\mathbf{x}j}^2}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sigma_{\mathbf{x}j}^2} \right) \mathbb{E}_{q_j(z_j)} [z_j^2] + \frac{\mu_{\mathbf{x}j}}{\sigma_{\mathbf{x}j}^2} \mathbb{E}_{q_j(z_j)} [z_j] = \dots \end{aligned}$$

Вычисление L_{reg} (4)

Математические ожидания:

$$\mathbb{E}_{q_j(z_j)} [z_j] = \mu_{xj},$$

$$\mathbb{D}_{q_j(z_j)} [z_j] = \mathbb{E}_{q_j(z_j)} [z_j^2] - \mu_{xj}^2 = \sigma_{xj}^2 \quad \Rightarrow \quad \mathbb{E}_{q_j(z_j)} [z_j^2] = \sigma_{xj}^2 + \mu_{xj}^2.$$

Подстановка:

$$\begin{aligned} \dots &= -\frac{1}{2} \log(\sigma_{xj}^2) - \frac{\mu_{xj}^2}{2\sigma_{xj}^2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sigma_{xj}^2} \right) (\sigma_{xj}^2 + \mu_{xj}^2) + \frac{\mu_{xj}}{\sigma_{xj}^2} \mu_{xj} \\ &= -\frac{1}{2} \log(\sigma_{xj}^2) - \frac{\mu_{xj}^2}{2\sigma_{xj}^2} + \frac{1}{2} \left(\sigma_{xj}^2 + \mu_{xj}^2 - 1 - \frac{\mu_{xj}^2}{\sigma_{xj}^2} \right) + \frac{\mu_{xj}^2}{\sigma_{xj}^2} \\ &= -\frac{1}{2} \log(\sigma_{xj}^2) + \frac{1}{2} \sigma_{xj}^2 + \frac{1}{2} \mu_{xj}^2 - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2} (\sigma_{xj}^2 + \mu_{xj}^2 - 1 - \log(\sigma_{xj}^2)) \end{aligned}$$

Итоговые формулы:

$$L_{\text{rec}} = \frac{1}{2c} \|\mathbf{x} - g_{\phi}(\mathbf{z})\|_2^2,$$

$$L_{\text{reg}} = \sum_{j=1}^M \frac{1}{2} (\sigma_{\mathbf{x}j}^2 + \mu_{\mathbf{x}j}^2 - 1 - \log(\sigma_{\mathbf{x}j}^2)) .$$

Дополнение: Для L_{rec} также можно использовать кросс-энтропию.

Reparametrization trick

$$\mathbf{z}_j \sim \mathcal{N}(\mathbf{z}_j \mid \mu_{\mathbf{x}j}, \sigma_{\mathbf{x}j}^2) \Leftrightarrow \begin{cases} \epsilon_j \sim \mathcal{N}(0, 1), \\ \mathbf{z}_j = \mu_{\mathbf{x}j} + \sigma_{\mathbf{x}j} \epsilon_j. \end{cases}$$

Поскольку:

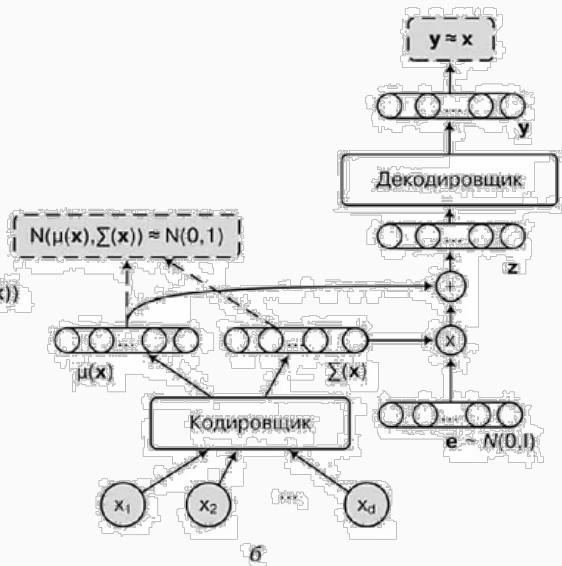
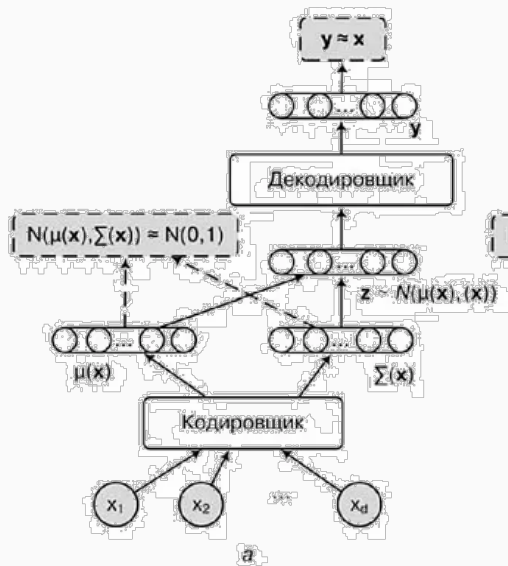
$$p_{\epsilon}(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{2}\right),$$

$$\epsilon = \frac{z - \mu_{\mathbf{x}}}{\sigma_{\mathbf{x}}}, \quad \sigma_{\mathbf{x}} > 0,$$

$$\left| \frac{d\epsilon}{dz} \right| = \frac{1}{\sigma_{\mathbf{x}}},$$

$$p_z(z) = p_{\epsilon}\left(\frac{z - \mu_{\mathbf{x}}}{\sigma_{\mathbf{x}}}\right) \left| \frac{d\epsilon}{dz} \right| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\mathbf{x}}} \exp\left(-\frac{(z - \mu_{\mathbf{x}})^2}{2\sigma_{\mathbf{x}}^2}\right).$$

Архитектура VAE



Проблема: $\forall i \quad 0 < \sigma_{xi}^2 \ll 1$ — маленькие значения могут приводить к ошибкам численных расчетов.

Решение: Использовать логарифмированное значение σ_{xi}^2 :

$$\log \sigma_{xi}^2 \in \mathbb{R}^M.$$

Репараметризация:

$$\begin{aligned}\epsilon_j &\sim \mathcal{N}(0, 1), \\ \mathbf{z}_j &= \mu_{xj} + \exp\left(\frac{1}{2} \log \sigma_{xi}^2\right) \epsilon_j.\end{aligned}$$



Заключение

Сравнительный анализ методов: особенности применения (1)

Ключевые отличия:

- **РСА:** базовый линейный метод, идеален для анализа небольших и линейных зависимостей. Часто используется для визуализации и как отправная точка в анализе данных.
- **КРСА:** позволяет работать с нелинейной структурой данных, но требует осторожного выбора ядерной функции и гиперпараметров. Идеален для задач распознавания образов и биоинформатики.
- **АЕ:** предоставляет большую гибкость благодаря нейронным сетям. Находит применение в обработке данных и сложных задачах анализа.

Сравнительный анализ методов: особенности применения (2)

- **VAE:** расширяет автоэнкодеры за счет вероятностной модели, идеально подходит для задач генерации данных и анализа латентных переменных.

Дополнительно:

- Все методы обладают уникальными преимуществами и ограничениями, что делает их подходящими для разных классов задач.
- Выбор метода зависит от структуры данных, целей анализа и доступных вычислительных ресурсов.

Заключение (1)

Современные вызовы: Работа с высокоразмерными данными требует гибких и мощных инструментов.

Основные итоги:

- **Линейные методы** (например, PCA) остаются незаменимыми благодаря своей простоте и эффективности.
- **Нелинейные подходы**, такие как KPCA, открывают возможности работы с более сложными структурами данных.
- **Автоэнкодеры** обеспечивают исключительную гибкость для задач генерации данных и анализа скрытых зависимостей.

Рекомендации по выбору:

- Для интерпретируемости и быстродействия – линейные методы.
- Для работы с нелинейными структурами – Kernel PCA.
- Для генерации данных – автоэнкодеры и их вариации.

Вывод: Методы понижения размерности предоставляют исследователям мощный арсенал для анализа данных, повышая информативность, эффективность и удобство визуализации.