Вопросы понижения размерности данных: от классических алгоритмов, до современных вариантов на базе ГО.

Поглазов Никита 2384

ЛЭТИ 2024 Семинар по ИИ

Содержание

Введение

В современном мире часто приходится сталкиваться с задачей обработки данных высокой размерности, будь то изображения, текстовые данные или сложные наборы числовых признаков. Однако избыточность данных и так называемое "проклятие размерности" могут значительно ухудшать производительность моделей, затруднять интерпретацию результатов и увеличивать вычислительные затраты.

В свою очередь, методы понижения размерности помогают решать эти проблемы, позволяя выявить наиболее важные признаки, отбрасывая шум и оптимизируя процесс обучения моделей. Существуют как классические методы понижения размерности, такие как анализ главных компонент (PCA), так и современные подходы на основе глубокого обучения, такие как AutoEncoders. Каждый из этих методов имеет свои сильные и слабые стороны, различную применимость в зависимости от типа задачи и структуры данных.

Цель данного доклада — рассмотреть особенности этих методов, их теоретическое обоснование, основные области применения, а также плюсы и минусы каждого подхода.

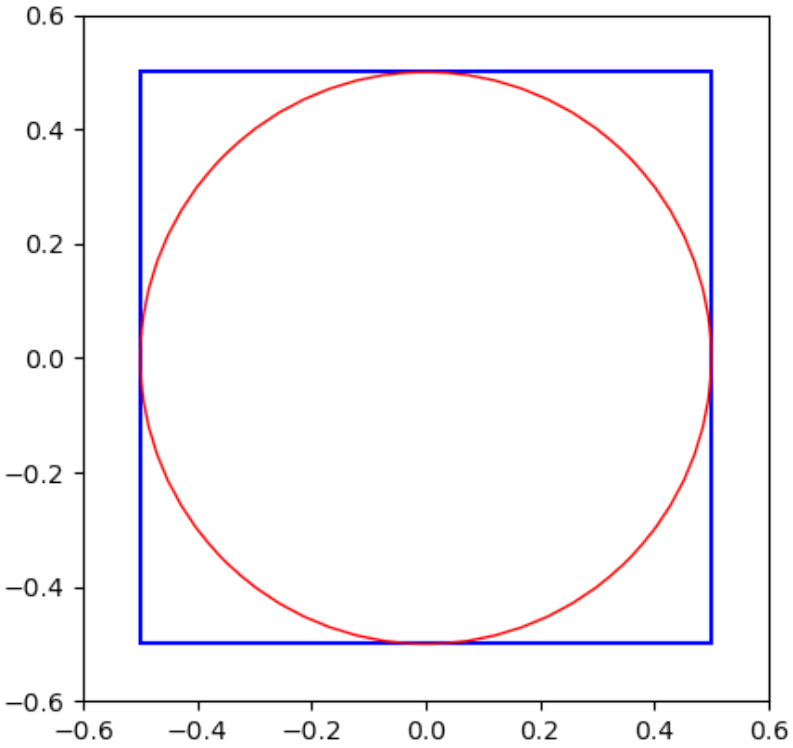
Мотивация

Влияние проклятия размерности на распределение данных

Что такое "проклятие размерности"?

Давайте попробуем разобраться в этом явлении. Для этого проведем небольшой эксперимент с многомерными пространствами.

Возьмем квадрат со сторонами 1, в который вписан круг.



$S_{square} = 1$

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

То есть круг занимает $\approx 79\%$ площади квадрата.

Обобщим задачу до гиперсферы, вписанной в гиперкуб в n-мерном пространстве. Очевидно, что объем гиперкуба остается равным 1. Но что станет с объемом вписанной гиперсферы? Он увеличится, уменьшится или останется неизменным?

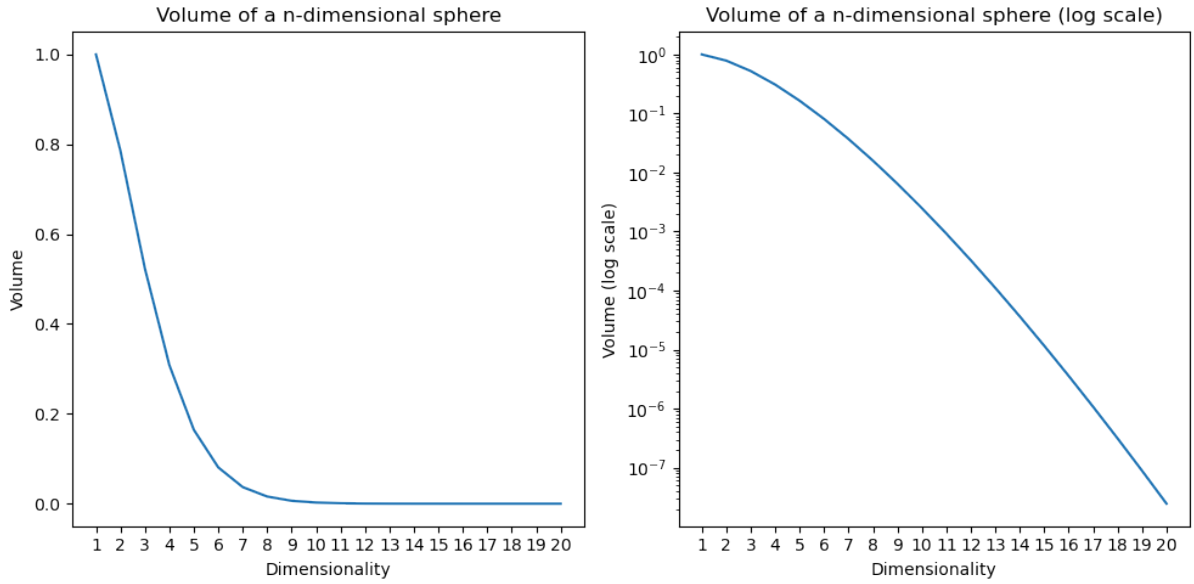
Опытные математики знают ответ на этот вопрос, но его тяжело осознать, ведь, как исторически сложилось, мы живем в трехмерном пространстве.

Объем n-мерной гиперсферы задается следующим соотношением:

$$V_n = C_n R^n$$

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

Как видно, в знаменателе стоит Гамма функция, которая растет быстрее экспоненциальной функции в числителе. То есть $\lim_{n\to\infty} V_n = 0$.



Тем временем, диагональ гиперкуба будет равна

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} 1^2} = \sqrt{n}$$

То есть она будет постоянно увеличиваться и все больше объема будет приходиться на углы куба.

Если данные будут находиться в $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^n$, то потребуется все больше и больше наблюдений, чтобы с заданной точностью описать вписанную (или, что хуже, произвольную) гиперсферу.

Влияние на метрические модели

Рассмотрим манхеттенские (L_1) расстояния между двумя точками в n-мерном пространстве.

$$d(x^{(i)}, x^{(j)}) = ||x^{(i)} - x^{(j)}||_1 = \sum_{k=1}^{n} |x^{(i)} - x^{(j)}|$$

Согласно закону больших чисел

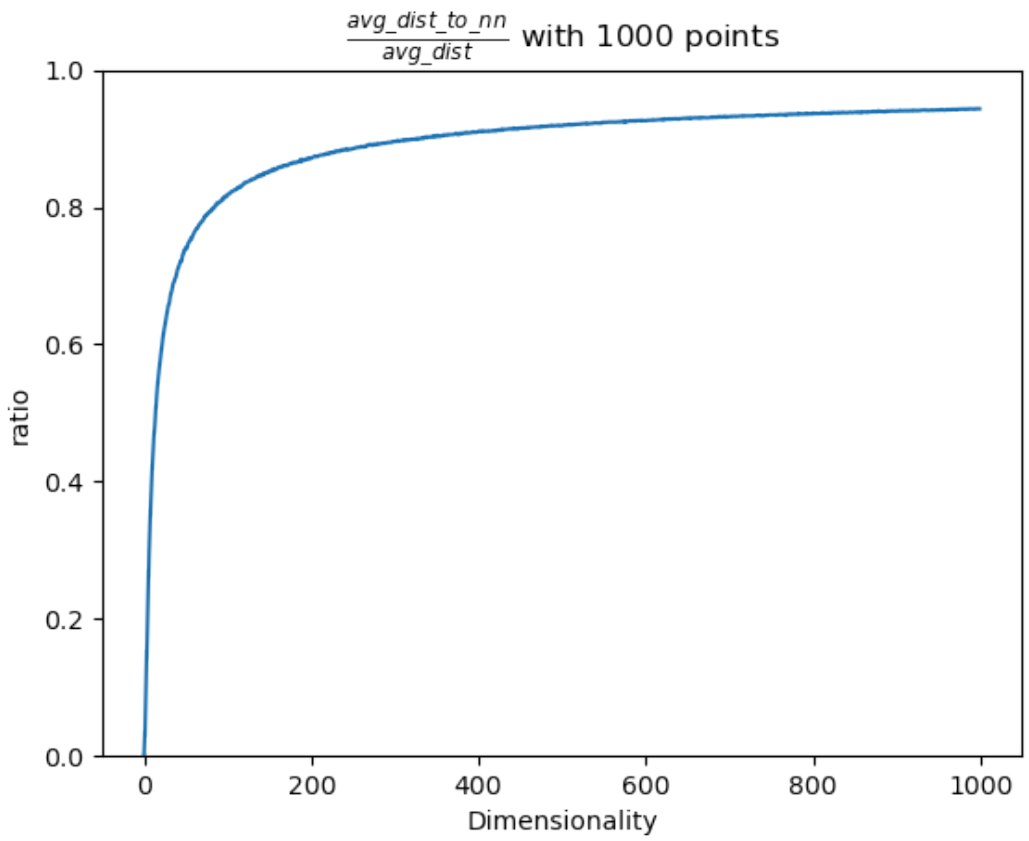
$$\lim_{n\to\infty} \frac{d(x^{(i)}, x^{(j)})}{n} = \mu$$

Где μ - среднее расстояние между всеми наблюдениями.

Также это будет сохраняться и для любой другой L_p-нормы.

На графике изображено отношение среднего расстояния между ближайшим соседом с средним расстоянием между двумя точками. В эксперименте генерируется 1000

точек $\xi \sim U([0,1)^n)$. Расстояние евклидово.



Видно, что с увеличением размерности отношение стремится к 1, т.е. среднее расстояние между ближайшими соседями стремится к среднему расстоянию между двумя точками.

Таким образом, при увеличении размерности, одно и то же количество точек будет находиться в пространстве на все более равном расстоянии. Это серьезно влияет на производительность метрических моделей, таких как kNN и k-Means.

Влияние на линейные модели

Аналитическое решение задачи линейной регрессии с оптимизацией MSE:

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

Где X - наблюдения, y - целевые значения, $\hat{\beta}$ - оптимизируемые веса.

При центрировании данных матрица ковариации равна:

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

Где k - число наблюдений.

Чем более скоррелированны признаки в наблюдениях, тем более близкой к вырожденной становится матрица ковариации, что влечет за собой нестабильные

значения весов и переобучение модели. А с ростом размерности увеличивается и вероятность мультиколлинеарности.

Влияние на "деревянные" модели

Проклятие размерности оказывает сильное влияние на процесс построения дерева решений (*Decision Tree*), ведь с ростом размерности для каждого разбиения становится сложно найти оптимальную точку разделения, так как требуется анализировать экспоненциально больше комбинаций.

Из-за разреженности данных, если большинство признаков нерелевантны, алгоритм может сделать разбиение по случайным направлениям, ухудшая обобщающую способность модели.

Деревья решений известны своей способностью к переобучению, что является еще большей проблемой при высоких размерностях.

По тем же причинам алгоритмы бустинга (AdaBoost и Gradient Boosting в частности) не очень эффективны при больших размерностях, т.к. используют в качестве базовых моделей "слабые" классификаторы (*weak learners*), например решающие пни (деревья глубины 1), которые сами по себе чувствительны к проклятию размерности по вышеописанным причинам.

С другой стороны, случайные леса (*Random Forest*) используют RSM (*Random Subspace Method*) - метод случайного выбора подмножества признаков для каждого дерева, в сочетании с бэггингом для обучения отдельных деревьев, что снижает размерность пространства для обучения. Проблема может возникнуть, в том, случае, если много признаков не коррелируют с целевой переменной, что приведет к увеличению числа моделей в ансамбле.

Влияние на глубокие нейронные сети

Влияние "проклятия размерности" на глубокие нейронные сети (*DNN*) существенно зависит от их архитектуры, активационных функций и глубины. Несмотря на то, что DNN часто считаются устойчивыми к данным высокой размерности, это не означает, что они полностью свободны от проблем, вызванных разреженностью и избыточностью данных.

Некоторые архитектуры глубоких нейронных сетей, такие как сверточные нейронные сети (*CNN*), рекуррентные нейронные сети (RNN) и трансформеры, имеют механизмы, которые помогают справляться с высокой размерностью данных:

CNN эффективно работают с высокоразмерными входными данными (например, изображениями), выделяя локальные взаимосвязи с помощью сверточных фильтров. Вместо обработки каждого признака по отдельности они сворачивают соседние значения, уменьшая размерность в скрытых слоях.

RNN и LSTM (*Long short-term memory*) справляются с последовательными данными (например, текстами или временными рядами) благодаря способности моделировать временные зависимости. Они эффективно используют архитектуру, где высокая размерность сосредоточена на временных характеристиках, а не на пространственном распределении.

Трансформеры используют механизм внимания (*attention*), позволяющий моделировать только значимые зависимости между признаками. Это делает их особенно устойчивыми при работе с высокоразмерными пространствами, так как они изолируют релевантные признаки, игнорируя нерелевантные.

Несмотря на описанные преимущества, глубокие нейронные сети могут сталкиваться с рядом сложностей. Наличие нерелевантных признаков увеличивает риск запоминания шума, особенно для табличных данных и высокая размерность усложняет поиск глобального минимума в функции потерь градиентными методами.

Общее влияние

Основная проблема высокой размерности для моделей машинного обучения с учителем заключается в кратном увеличении времени обучения (особенно сильно это затрагивает DNN).

Большое количество признаков мешает интерпретируемости табличных данных, что сильно затрудняет анализ для задач бизнеса.

Также с увеличением числа признаков, растет вероятность того, что часть из них не будет содержать полезной для обучения информации (что особенно влияет на "деревянные" модели). Модель может начать «учиться» на шуме, а не на реальных зависимостях, что приводит к переобучению.

Выводы

Проклятие размерности оказывает фундаментальное влияние на большинство алгоритмов машинного обучения, требуя либо снижения размерности данных, либо адаптации моделей под многомерные данные.

Теперь, осознав проблематику, можем перейти к одному из способов ее решения: алгоритмам сжатия данных.

Методы понижения размерности: Обзор и Классификация

Существуют два ключевых подхода к понижению размерности: **отбор признаков** и **преобразование признаков**. В первом случае методы выбирают подмножество исходных переменных, которые лучше всего объясняют данные. Во втором —

исходное пространство преобразуется в пространство меньшей размерности с сохранением наиболее значимых свойств.

В этом разделе обзорно рассмотрим большую часть алгоритмов понижения размерности. В следующем разделе максимально подробно рассмотрим самые популярные и часто используемые из них.

Линейные методы

Линейные методы опираются на предположение, что данные можно эффективно описать в пространстве меньшей размерности при помощи линейных комбинаций исходных признаков.

Метод главных компонент (*Principal Component Analysis, PCA*)

PCA — один из наиболее известных методов преобразования признаков. Цель метода заключается в нахождении ортогональных векторов, называемых главными компонентами, которые объясняют максимальную дисперсию в данных.

Часто используется для визуализации высокоразмерных данных. Например, в геномике метод позволяет уменьшить размерность набора данных, содержащего экспрессию тысяч генов, для последующей кластеризации образцов.

Разреженный PCA (*Sparse PCA, SPCA*)

Разреженный PCA расширяет стандартный PCA, добавляя ограничение на разреженность главных компонент. Это делает метод особенно полезным для высокоразмерных данных, где многие признаки могут быть нерелевантны.

Применяется для выбора интерпретируемых компонентов в больших наборах данных, например, в финансовой аналитике для выделения ключевых показателей рынка, исключая шумовые признаки.

Линейный дискриминантный анализ (*Linear Discriminant Analysis, LDA*)

LDA – это метод, который сочетает снижение размерности с задачей классификации. В отличие от PCA, который сосредоточен на сохранении максимальной дисперсии в данных, LDA оптимизирует разбиение между заранее определенными классами. Этот метод ищет проекции, которые максимизируют разницу между классами, одновременно минимизируя разброс внутри каждого класса.

Основная идея заключается в оптимизации двух матриц: межклассовой дисперсии (между центроидами классов) и внутриклассовой дисперсии (распределения точек внутри каждого класса). Итоговое проецирование основывается на нахождении направлений, которые лучше всего разделяют данные по классам.

Находит широкое применение в задачах, где важна не только визуализация данных, но и разделение классов. Например, в биометрии он используется для обработки

изображений лиц. В задаче распознавания лиц LDA помогает выделить направления, где лица из разных классов (разных людей) лучше всего разделяются, сохраняя различия, важные для классификации.

Каноническое корреляционное преобразование (*Canonical Correlation Analysis, CCA*)

CCA — метод, нацеленный на изучение корреляций между двумя датасетами. Алгоритм находит линейные комбинации признаков из обоих наборов, которые максимально коррелируют друг с другом.

Удобен для анализа связей между двумя группами данных (например, между анкетными данными и биометрическими показателями).

Нелинейные методы

Линейные подходы эффективно работают на данных, где зависимости между признаками можно выразить линейными комбинациями. Однако многие реальные задачи требуют работы с нелинейными структурами данных. Нелинейные методы снижения размерности адаптированы для работы с такими случаями, раскрывая сложные взаимосвязи между признаками, которые невозможно отобразить линейными моделями.

Ядерный PCA (*Kernel PCA, KPCA*)

Ядерный PCA представляет собой расширение классического PCA для работы с нелинейными структурами данных. Основная идея заключается в использовании **ядерной функции (*kernel function*)**, которая позволяет выполнить преобразование исходных данных в пространство более высокой размерности, где линейные зависимости становятся более явными. Затем метод PCA применяется уже в этом новом пространстве.

Используемая ядерная функция, например, **гауссовское ядро (*gaussian kernel*)**, создает возможность изучения сложных взаимосвязей в данных без необходимости явного вычисления координат в новом пространстве благодаря **ядерному трюку (*kernel trick*)**.

Ядерный PCA находит применение в задачах с данными, имеющими сложную нелинейную структуру. Например, в задачах анализа изображений он помогает выявлять скрытые шаблоны, такие как текстуры или формы объектов, которые трудно определить линейными методами. Кроме того, метод эффективен в задачах биоинформатики, таких как предсказание активности молекул на основе их химической структуры.

t-SNE (*t-Distributed Stochastic Neighbor Embedding*)

t-SNE – метод, разработанный для визуализации данных высокой размерности в пространствах низкой размерности (чаще всего в двух или трех). Он не сохраняет глобальную структуру данных, но стремится сохранить локальные расстояния между точками, что делает его особенно полезным для обнаружения кластеров.

Основная идея t-SNE заключается в том, чтобы минимизировать расхождение между распределением пар расстояний в исходном пространстве и их отображением в пространстве низкой размерности. Для этого используется **расхождение Кульбака-Лейблера (*KL-divergence*)**, которое измеряет различие между двумя вероятностными распределениями.

t-SNE особенно популярен в задачах визуализации результатов моделей, например, для кластеризации геномных данных или оценки эмбеддингов, созданных глубокими нейронными сетями.

UMAP (*Uniform Manifold Approximation and Projection*)

UMAP – это более современный метод, разработанный для решения тех же задач, что и t-SNE, но с улучшенной производительностью и дополнительной способностью сохранять глобальные структуры данных. UMAP опирается на теорию топологии и стремится сохранять геометрические свойства исходного пространства.

Метод строит взвешенный граф соседей данных в исходном пространстве, а затем аппроксимирует его в пространстве меньшей размерности, минимизируя расхождения. В отличие от t-SNE, UMAP масштабируется лучше на больших объемах данных и может использоваться не только для визуализации, но и для предобработки данных перед обучением моделей.

Примером успешного применения UMAP является визуализация паттернов активности мозга на основе сигналов ЭЭГ, где важно учитывать как локальные, так и глобальные взаимосвязи в данных.

Автоэнкодеры (AutoEncoders)

Автоэнкодеры – это семейство нейронных сетей, которые обучаются сжимать данные в пространство меньшей размерности, а затем восстанавливать их в исходной форме. Они состоят из двух частей: кодировщика, который преобразует данные в представление с низкой размерностью, и декодировщика, который восстанавливает данные обратно.

Обучение автоэнкодера происходит путем минимизации функции потерь, измеряющей разницу между входными данными и их восстановленной версией. Это позволяет сети находить компактные представления данных, сохраняя важную информацию.

Автоэнкодеры (и их модификации) широко применяются в задачах сжатия изображений, обнаружения аномалий и генерации данных. Например, в обработке

изображений автоэнкодеры могут эффективно удалять шум, выделяя только значимые структуры данных.

Вариационные автоэнкодеры (*Variational AutoEncoders, VAEs*)

Вариационные автоэнкодеры являются расширением классических автоэнкодеров. Они используются для снижения размерности данных и генерации новых образцов, похожих на исходные. Отличие от стандартных автокодировщиков заключается в вероятностной интерпретации скрытого пространства.

Ключевая идея заключается в том, чтобы представлять сжатые данные не как фиксированное значение, а как распределение, параметры которого (среднее и дисперсия) обучаются в процессе оптимизации. Это достигается добавлением к функции потерь термина, минимизирующего расхождение между апостериорным распределением в скрытом пространстве и заданным априорным распределением (обычно нормальным).

Преимущества VAEs:

- Они создают **непрерывное скрытое пространство**, что позволяет эффективно интерполировать между точками в данных.
- Поддерживают генерацию новых данных (например, изображений, текстов или сигналов), что делает их популярными в задачах обработки изображений и работы с текстовыми данными.

Примером использования VAEs является генерация новых образцов в биологии, таких как синтез молекул с заданными свойствами, или улучшение качества изображений через удаление шумов.

Выводы

Мы рассмотрели основные методы понижения размерности, которые можно разделить на линейные и нелинейные подходы. Каждый из них имеет свои особенности и области применения, в зависимости от структуры данных и целей задачи.

Чтобы успешно применять эти методы, важно понимать их теоретические основы, ограничения и условия, при которых они работают наиболее эффективно. В следующем разделе мы детально исследуем теорию, лежащую в основе некоторых из описанных подходов. После этого мы рассмотрим их практическое применение, чтобы показать, как алгоритмы работают в реальных задачах и какие результаты они могут дать.

Principal Component Analysis (*PCA*)

Постановка задачи

Дан **неразмеченный** датасет данных $X = \{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^N,\ \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^D$. Без потери общности предполагаем, что данные центрированы, т.е. $\mathbb{E}[\boldsymbol{x}_i] = 0$. Тогда матрица ковариации данных выражается как:

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

Положим, что существует сжатое представление (кодировка) данных, полученных после линейного преобразования

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

где

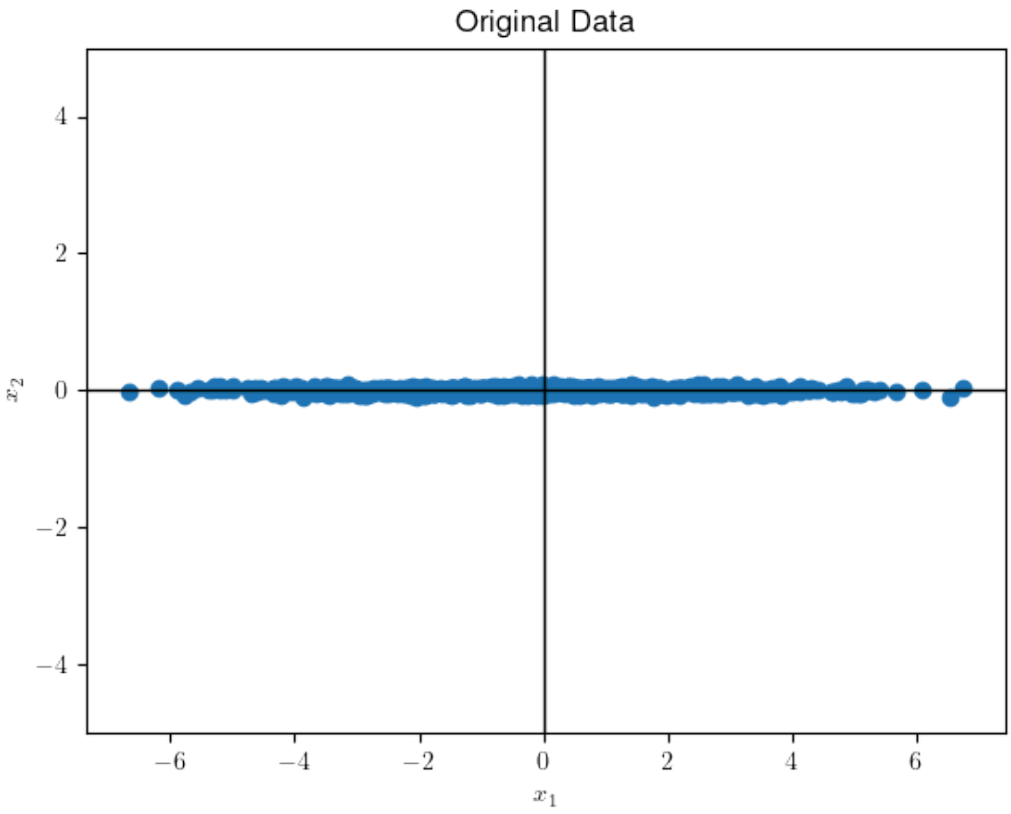
$$\mathbf{B} = [\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \ldots,\ \boldsymbol{b}_M] \in \mathbb{R}^{D \times M}, \boldsymbol{b}_i^T \boldsymbol{b}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

то есть, $\mathbf{B}$ - ортогональный базис, $\boldsymbol{z}_i$ - координаты вектора $\boldsymbol{x}_i$ в новом базисе.

Тогда $\tilde{\boldsymbol{x}_i} = \mathbf{B}\boldsymbol{z}_i$ - восстановленный вектор $\boldsymbol{x}_i$ в исходном пространстве.

Простой пример

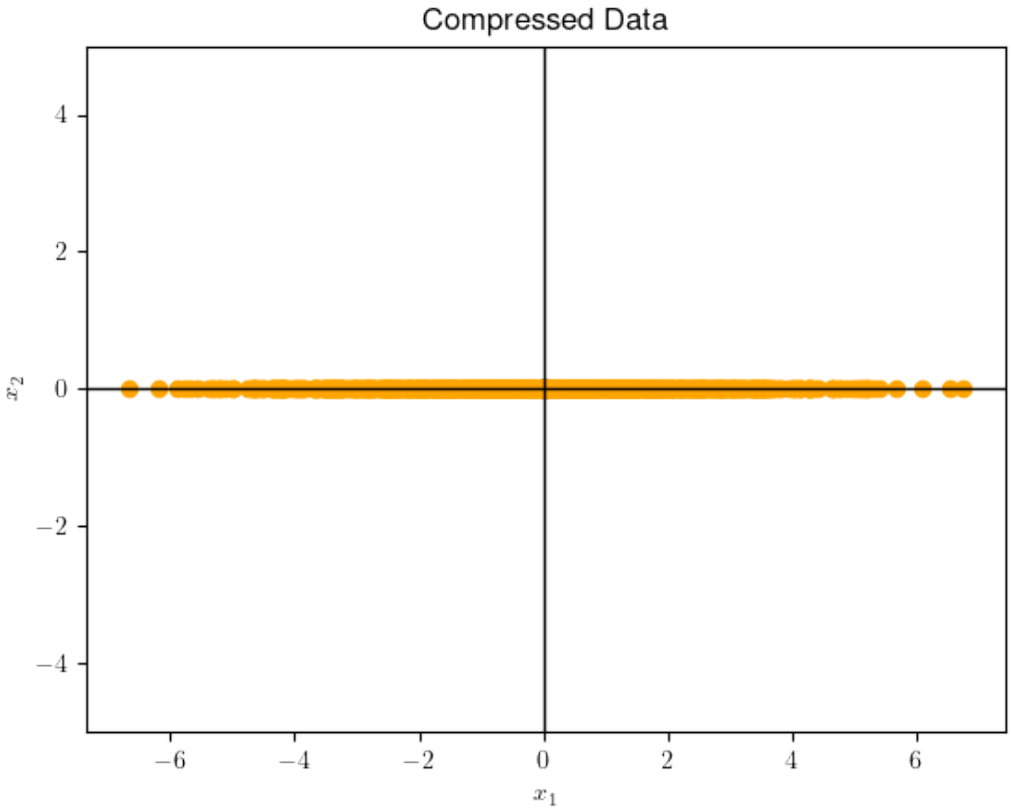
$\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^2$:



Пусть $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, тогда $\boldsymbol{z}_i = \mathbf{B}^T \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_{i1}$ - первая компонента вектора $\boldsymbol{x}_i$.

Пусть $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 5 \\ \frac{1}{100} \end{bmatrix}$, тогда $\boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ \frac{1}{100} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \end{bmatrix}$.

Тогда $\tilde{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}$ - вектор в исходном пространстве.



Нахождение направления с наибольшей дисперсией

Если мы рассматриваем содержание информации в данных как заполненность пространства, то мы хотим чтобы дисперсия сжатых данных, как показатель разброса, была максимальной.

Начнем с поиска направления, вдоль которого дисперсия данных максимальна, то есть дисперсии первой координаты $\boldsymbol{z}$ - z_1:

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

Одна из причин, почему базис $\mathbf{B}$ ортонормирован, заключается в том, что V_1 квадратично зависит от $\boldsymbol{b}_1$ и если бы $\boldsymbol{b}_1$ был не нормирован, то мы могли бы увеличить V_1 путем увеличения длины $\boldsymbol{b}_1$.

Таким образом, имеем задачу условной оптимизации:

$$\begin{aligned}&\max_{\boldsymbol{b}_1} \boldsymbol{b}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{b}_1, \\ &\text{s.t. } \boldsymbol{b}_1^T \boldsymbol{b}_1 = 1.\end{aligned}$$

Получаем функцию Лагранжа:

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{b}_1, \lambda) = \boldsymbol{b}_1^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{b}_1 - \lambda_1 (\boldsymbol{b}_1^T \boldsymbol{b}_1 - 1).$$

Частные производные по $\boldsymbol{b}_1$ и λ:

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

Следовательно:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{b}_1 &= \lambda_1 \boldsymbol{b}_1, \\ \boldsymbol{b}_1^T \boldsymbol{b}_1 &= 1.\end{aligned}$$

Таким образом, $\boldsymbol{b}_1$ - собственный вектор матрицы ковариации $\boldsymbol{\Sigma}$, а λ_1 - собственное значение.

Теперь можем переписать дисперсию V_1 как:

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

$\boldsymbol{b}_1$ - первая главная компонента, а λ_1 - дисперсия вдоль этого направления. Также, поскольку $\sqrt{\lambda_1}$ - стандартное отклонение, то его называют нагрузкой первой главной компоненты.

Нахождение остальных главных компонент

Положим, что мы уже нашли $m - 1$ главных компонент как собственные векторы матрицы ковариации. Поскольку $\boldsymbol{\Sigma}$ - симметричная, то по спектральной теореме мы можем использовать эти векторы как ортонормированный базис подпространства размерности $m - 1$ в $\mathbb{R}^D$.

Тогда, чтобы найти m-ю главную компоненту, мы можем рассмотреть новую задачу условной оптимизации:

$$\max_{\boldsymbol{b}_m} \boldsymbol{b}_m^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{b}_m,$$
$$\text{s.t. } \boldsymbol{b}_m^T \boldsymbol{b}_m = 1,$$
$$\boldsymbol{b}_m^T \boldsymbol{b}_i = 0,\ \forall i < m.$$

Функция Лагранжа:

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

Частные производные:

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

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

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

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

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

$\boldsymbol{\Sigma}$ симметрична, поэтому $\boldsymbol{b}_j^T \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{b}_m = \left\langle (\boldsymbol{b}_j^T \boldsymbol{\Sigma})^T, \boldsymbol{b}_m \right\rangle = \langle \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{b}_j, \boldsymbol{b}_m \rangle = \langle \lambda_j \boldsymbol{b}_j, \boldsymbol{b}_m \rangle = \lambda_j \langle \boldsymbol{b}_j, \boldsymbol{b}_m \rangle = 0$. Тогда $\mu_j = 0.$ и, аналогично, $\forall j < m\ \ \mu_j = 0.$

Таким образом:

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

Вновь, $\boldsymbol{b}_m$ - собственный вектор матрицы ковариации $\boldsymbol{\Sigma}$, а λ_m - собственное значение.

Таким образом, объясненная дисперсия первых m главных компонент равна $\sum_{i=1}^{m} \lambda_i$. Также вместо абсолютных величин, мы можем использовать долю объясненной дисперсии, которая равна $\frac{\sum_{i=1}^{m} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{D} \lambda_i}$.

Детали реализации

Замечание: в приведенных выше формулах строение матрицы X отличается от привычного - строки матрицы X - это признаки, а столбцы - объекты. Поэтому, на практике формулы кодирования и декодирования данных в пространстве главных компонент будут отличаться от выше приведенных:

$$\boldsymbol{Z} = \mathbf{B}^T \boldsymbol{X},$$
$$\tilde{\boldsymbol{X}} = \mathbf{B}\boldsymbol{Z}.$$

а также матрица ковариации (при центрировании данных):

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{N}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T.$$

Kernel Principal Component Analysis (*KPCA*)

Постановка задачи

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

Также дано (нелинейное) преобразование $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{H}$, где $\mathbb{H}$ - гильбертово пространство;
или функция (ядро) $k : \mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}$, такая что $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \langle \phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{y}) \rangle_{\mathbb{H}}$.

Цель - найти линейное подпространство в $\mathbb{H}$ размерности P, на которое $\{\phi(\boldsymbol{x}_i)\}_{i=1}^N$ проецируются **оптимально**. т.е. расстояние в исходном пространстве между $\boldsymbol{x}_i$ и его проекцией будет минимально.

Утверждение: по произвольной функции ϕ можно построить ядро k. Функция k тогда будет положительно определенной, т.е. матрица Грама K (матрица, где $K_{ij} = \langle x_i, x_j \rangle$) будет положительно определенной.

Утверждение (*Moore-Aronsajn theorem*): по произвольной положительно определенной функции k можно построить преобразование ϕ и гильбертово пространство $\mathbb{H}$, так что $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \langle \phi(\boldsymbol{x}), \phi(\boldsymbol{y}) \rangle_{\mathbb{H}}$.

Пусть $\mathbb{H} = \mathbb{R}^H,\ H \gg D$ (не хотим возиться с бесконечномерным случаем).

Наивный подход

1. Вычислить $\{\phi(\boldsymbol{x}_i)\}_{i=1}^N$
2. Используем PCA на $\{\phi(\boldsymbol{x}_i)\}_{i=1}^N$

Проблемы:

1. Вычисление $\phi(\boldsymbol{x}_i)$ может быть дорогим (и вообще ϕ обычно нам не дано, дано только k).
2. Теорема **Moore-Aronsajn** конструктивная, но дает неприменимые на практике ϕ.
3. Придется работать с матрицей ковариации размера $H \times H$.

Kernel Trick

Положим, что $\{\phi(\boldsymbol{x}_i)\}_{i=1}^N$ у нас есть и составим из них $\boldsymbol{\Phi}$ - матрицу размера $N \times H$.
PCA предлагает сформировать матрицу

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

и найти главные компоненты:

$$\mathbf{\Sigma}\omega_p = \lambda_i\omega_p \qquad\qquad p = 1, 2, \ldots, P.$$

Подставим $\mathbf{\Sigma}$:

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

То есть главные компоненты ω_p можно представить как линейную комбинацию $\phi(\boldsymbol{x}_i)$:

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

Подставим это в уравнение для ω_p:

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\phi(\boldsymbol{x}_i)\langle\phi(\boldsymbol{x}_i), \sum_{j=1}^{N}\alpha_{p,j}\phi(\boldsymbol{x}_j)\rangle_{\mathbb{H}} = \lambda_p\sum_{i=1}^{N}\alpha_{p,i}\phi(\boldsymbol{x}_i),$$
$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\phi(\boldsymbol{x}_i)\phi(\boldsymbol{x}_i)^T\sum_{j=1}^{N}\phi(\boldsymbol{x}_j)\alpha_{p,j} = \lambda_p\sum_{j=1}^{N}\alpha_{p,j}\phi(\boldsymbol{x}_j),$$
$$\frac{1}{N}\mathbf{\Phi}^T\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T\boldsymbol{\alpha}_p = \lambda_p\mathbf{\Phi}^T\boldsymbol{\alpha}_p,$$
$$\mathbf{\Phi}^T(\mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T\boldsymbol{\alpha}_p - N\lambda_p\boldsymbol{\alpha}_p) = 0$$

Это выполнено, если $\boldsymbol{\alpha}_p$ - решение еще одной задачи собственных значений:

$$\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}_p = N\lambda_p\boldsymbol{\alpha}_p, \qquad\qquad \mathbf{K} = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Phi}^T.$$

Заметим, что $\mathbf{K}$ - матрица $N \times N$, причем $K_{ij} = k(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$.

Таким образом, для нахождения главных компонент $\boldsymbol{\omega}_p$ достаточно решить задачу выше.

Проекции на главные компоненты

Проекции на главные компоненты вычисляются даже без знания ϕ:

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

Таким образом проекции на главные компоненты вычисляются как $\mathbf{Z} = \mathbf{K}\boldsymbol{\alpha}$, где $\boldsymbol{\alpha}$ - матрица собственных векторов-столбцов $\mathbf{K}$.

Центрирование образов

Выжно заметить, что не смотря на то, что прообразы $\boldsymbol{x}_i$ центрированы, образы $\phi(\boldsymbol{x}_i)$ в общем случае нет (например, при $\phi(x) = x^2$). Поэтому, чтобы применить KPCA, необходимо центрировать образы $\phi(\boldsymbol{x}_i)$:

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

Тогда вместо k используем $\tilde{k}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \langle \tilde{\phi}(\boldsymbol{x}), \tilde{\phi}(\boldsymbol{y}) \rangle_{\mathbb{H}}$, то есть:

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

В таком случае матрица $\mathbf{K}$ вычисляется как:

$$
\tilde{\mathbf{K}} = \left(\mathbf{E} - \frac{1}{N} \mathbf{1}\mathbf{1}^T \right) \mathbf{K} \left(\mathbf{E} - \frac{1}{N} \mathbf{1}\mathbf{1}^T \right), \qquad \mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}^T.
$$

Детали реализации

На практике чаще всего используется ядро Гаусса (*Radial Basis Function, RBF*):

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

Гильбертово пространство $\mathbb{H}$ в таком случае бесконечномерно, что позволяет "распутывать" сложные нелинейные зависимости в данных.

Проблема такого ядра заключается в плохой обусловленности матрицы $\mathbf{K}$ (ее диагонализация сложна и неустойчива). Альтернатива - ядра Матерна - обобщение ядра Гаусса.

Также есть и другие ядра:

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

Замечание: Проецированные вектора в исходном пространстве $\tilde{x}$, которые получались естественным образом в PCA, в KPCA не так просто получить. Для нахождения $\tilde{x}$ решается задача оптимизации:

$$\min_{\tilde{\boldsymbol{x}}} \|\phi(\tilde{\boldsymbol{x}}) - \sum_{j=1}^{P} \omega_j \langle \phi(\boldsymbol{x}), \omega_j \rangle_{\mathbb{H}} \|^2.$$

Математика, стоящая за итоговой реализацией обратного преобразования не будет рассмотрена в данной работе. Информацию можно найти в статье.

AutoEncoders (*AEs*)

Постановка задачи

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

Цель - путем нелинейных преобразований найти сжатое представление данных $\boldsymbol{z}_i \in \mathbb{R}^M,\ M < D$, такое чтобы восстановленные данные $\tilde{\boldsymbol{x}}_i$ были близки к исходным $\boldsymbol{x}_i$.

Построение нелинейной зависимости - задача, с которой хорошо справляются нейронные сети, в частности - MLP.

Архтиектура автоэнкодера

Encoder: $f_{\boldsymbol{\theta}} : \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^M$: $\boldsymbol{z} = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x})$, где $\boldsymbol{\theta}$ - параметры сети. $f_{\boldsymbol{\theta}}$ состоит из композиции нелинейных преобразований:

$$f_{\boldsymbol{\theta}} = f_L \circ f_{L-1} \circ \ldots \circ f_1, \qquad f_i = \sigma_{\mathrm{E}i}(\mathbf{W}_{\mathrm{E}i} \boldsymbol{z}_{i-1} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{E}i}),$$

где $\sigma_{\mathrm{E}i}$ - нелинейная функция активации, $\mathbf{W}_{\mathrm{E}i}$ - матрица весов, $\boldsymbol{b}_{\mathrm{E}i}$ - вектор смещения.

Decoder: $g_{\boldsymbol{\phi}} : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^D$: $\tilde{\boldsymbol{x}} = g_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{z})$, где $\boldsymbol{\theta}$ - параметры сети. $g_{\boldsymbol{\theta}}$ состоит из композиции нелинейных преобразований:

$$g_{\boldsymbol{\phi}} = g_L \circ g_{L-1} \circ \ldots \circ g_1, \qquad g_i = \sigma_{\mathrm{D}i}(\mathbf{W}_{\mathrm{D}i} \boldsymbol{z}_{i-1} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{D}i}),$$

где $\sigma_{\mathrm{D}i}$ - нелинейная функция активации, $\mathbf{W}_{\mathrm{D}i}$ - матрица весов, $\boldsymbol{b}_{\mathrm{D}i}$ - вектор смещения.

Полная архитектура автоэнкодера:

$$\boldsymbol{z} = f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}),$$
$$\tilde{\boldsymbol{x}} = g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z}).$$

Обучение автоэнкодера

Обучение автоэнкодера происходит путем минимизации функциии потерь, называемой ошибкой реконструкции (*reconstruction error*):

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

В случаях, когда автоэнкодер используется для снижения размерности, и на выходе автоэнкодера $\tilde{\boldsymbol{x}} \in [0, 1]^D$, то лучше использовать бинарную кросс-энтропию:

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

Аналогия с PCA

Мы рассмотрели PCA с точки зрения максимизации дисперсии данных. Также можно рассмотреть PCA с точки зрения минимизации ошибки реконструкции (и прийти к тем же результатам):

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

В случае, если

$$f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{W}_{\mathrm{E}}\boldsymbol{x}, \qquad g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z}) = \mathbf{W}_{\mathrm{D}}\boldsymbol{z},$$

то $\mathbf{W}_{\mathrm{E}} = \mathbf{B}^T,\ \mathbf{W}_{\mathrm{D}} = \mathbf{B}$, и автоэнкодер эквивалентен PCA.

Детали реализации

Variational AutoEncoders (*VAEs*)

Постановка задачи

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

Цель - обучить автоэнкодер так, чтобы его скрытое представление $\boldsymbol{z}_i \in \mathbb{R}^M$ было распределено по некоторому заданному распределению. Более конкретно, мы хотим, чтобы все латентное подпространство покрывало большую часть носителя $p(\boldsymbol{z}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \mathbf{0}, \mathbf{E})$, а каждое конкретное $\boldsymbol{z}_i$ было сэмплировано из нормального распределения со своими параметрами $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\sigma}_i^2)$.

Построение генеративной модели, в нашем случае - умение сэмплировать объекты из $p(\boldsymbol{x})$ (которое выражается через более простые распределения), близкие к объектам из обучающей выборки X.

Интуиция

Идея: $f_{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{x}} = \left(\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\sigma}^2_{\boldsymbol{x}}\right)$ - параметры нормального распределения, $\boldsymbol{\sigma}^2_{\boldsymbol{x}} = \operatorname{diag}(\begin{bmatrix} \sigma^2_{\boldsymbol{x}1} & \sigma^2_{\boldsymbol{x}2} & \dots & \sigma^2_{\boldsymbol{x}M} \end{bmatrix})$ - диагональная матрица ковариации, $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \mu_{\boldsymbol{x}1} & \mu_{\boldsymbol{x}2} & \dots & \mu_{\boldsymbol{x}M} \end{bmatrix}$ - средние.
В свою очередь, $\boldsymbol{z} \sim p(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{\psi}_{\boldsymbol{x}}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\sigma}^2_{\boldsymbol{x}})$, и $\tilde{\boldsymbol{x}} = g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z}) \sim p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z})$.

Проблема 1: В такой постановке VAE ничем не будет отличаться от обычного AE, поскольку для уменьшения ошибки реконструкции он будет стремиться к тому, чтобы $\boldsymbol{\sigma}^2_{\boldsymbol{x}} = \mathbf{0}$.

Решение: Введем дополнительный член в функции потерь, который будет штрафовать модель за отклонение параметров нормального распределения от стандартного нормального распределения (пока не знаем какой):

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \mathrm{L}_{\mathrm{rec}} + \alpha \mathrm{L}_{\mathrm{reg}}$$

Проблема 2: Операция сэмплирования из нормального распределения не дифференцируема, что делает невозможным использование градиентного спуска.

Правдоподобие $p(\boldsymbol{x})$

Положим, что совместное распределение данных и латентного пространства $p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$ параметризовано некоторым параметром $\phi \in \Phi$ (например, параметрами нейронной сети), и выражается непрерывной по ϕ функцией $\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}$:

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

Также напомним, как выражается правдоподобие $p(\boldsymbol{x})$:

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

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

Для построения генеративной модели, мы хотим максимизировать правдоподобие $p(\boldsymbol{x})$, то есть:

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

Для удобства, в дальнейшем опустим параметр ϕ в индексе $p_\phi(\boldsymbol{x})$.

Теорема Байеса

Напомним теорему байеса (в наших терминах):

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

Тогда:

$$p(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x}) = p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z})p(\boldsymbol{z}),$$

где $p(\boldsymbol{x})$ - априорное распределение, $p(\boldsymbol{z}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{z} \mid \mathbf{0}, \mathbf{E})$ - априорное распределение латентного пространства, $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z})$ - распределение декодера, $p(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{x})$ - распределение энкодера.

Хотелось бы сдлеать предположение, о том, что одно из распределений (оба не получится) имеет простое строение. В данном случае, мы можем предположить, что $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z}), c\mathbf{I})$.

Тогда:

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

Получаем сложное распределение $p(\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{x})$, которое мы попробуем аппроксимировать:

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

Вариационное приближение

Мы максимизируем правдоподобие $p(\boldsymbol{x})$, которе может быть записано как:

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

Напомним неравенства Йенсена:

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

Применим неравенство Йенсена к $\log$:

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

где $\mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}) \parallel p(\boldsymbol{z}))$ - дивергенция Кульбака-Лейблера между $q(\boldsymbol{z})$ и $p(\boldsymbol{z})$.

Мы получили вариационную нижнюю оценку на правдоподобие $p(\boldsymbol{x})$, которая также называется Evidence Lower Bound (*ELBO*):

$$
\log p(\boldsymbol{x}) \geq \mathbb{E}_{q(\boldsymbol{z})} \left[\log p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z}) \right] - \mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}) \parallel p(\boldsymbol{z})) \to \max_{q(z)},
$$

где $p(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{z}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z}), c\mathbf{I})$, матрица ковариации которого невырождена (при $\mathrm{c} \neq 0$), поэтому:

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

Тогда решаем задачу оптимизации:

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

Или:

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

Вспоминая интуицию, мы получили то, чего и хотели:

$$
\begin{aligned}
\mathrm{L}_{\text{rec}} &= \frac{1}{2c} \|\boldsymbol{x} - g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z})\|_2^2, \\
\mathrm{L}_{\text{reg}} &= \mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}) \parallel p(\boldsymbol{z})).
\end{aligned}
$$

Вычисление L_{reg}

Теперь, давайте приведем $\mathrm{KL}(q(\boldsymbol{z}) \parallel p(\boldsymbol{z}))$ к виду, который можно вычислить:

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

Остановимся на секунду и заметим, что мы получили общий факт: KL между двумя независимыми распределениями (не только нормальными) равна сумме KL между каждой независимой компонентой этих распределений.

Продолжим:

$$
\begin{aligned}
\ldots &= \sum_{j=1}^{M} \mathrm{KL}(q_j(\boldsymbol{z}_j) \parallel p_j(\boldsymbol{z}_j)) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \mathrm{KL}(\mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\boldsymbol{x}j}, \sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) \parallel \mathcal{N}(z_j \mid 0, 1)) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(\int_{z_j} \mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\boldsymbol{x}j}, \sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) \log \frac{\mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\boldsymbol{x}j}, \sigma^2_{\boldsymbol{x}j})}{\mathcal{N}(z_j \mid 0, 1)} dz_j \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(\mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[\log \mathcal{N}(z_j \mid \mu_{\boldsymbol{x}j}, \sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) - \log \mathcal{N}(z_j \mid 0, 1) \right] \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(\mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[-\frac{1}{2} \log(2\pi\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) - \frac{1}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} (z_j - \mu_{\boldsymbol{x}j})^2 + \frac{1}{2} \log(2\pi) + \frac{1}{2} z_j^2 \right] \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(\mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[-\frac{1}{2} \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) - \frac{1}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} (z_j - \mu_{\boldsymbol{x}j})^2 + \frac{1}{2} z_j^2 \right] \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(\mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[-\left(\frac{1}{2} \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) + \frac{\mu^2_{\boldsymbol{x}j}}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) z_j^2 + \frac{\mu_{\boldsymbol{x}j}}{\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} z_j \right] \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(-\left(\frac{1}{2} \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) + \frac{\mu^2_{\boldsymbol{x}j}}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) \mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[z_j^2 \right] + \frac{\mu_{\boldsymbol{x}j}}{\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[z_j \right] \right) = \ldots
\end{aligned}
$$

Остается два нехитрых математических ожидания:

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[z_j \right] = \mu_{\boldsymbol{x}j}, \\
&\mathbb{D}_{q_j(z_j)} \left[z_j \right] = \mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[z_j^2 \right] - \mu^2_{\boldsymbol{x}j} = \sigma^2_{\boldsymbol{x}j} \\
&\Rightarrow \mathbb{E}_{q_j(z_j)} \left[z_j^2 \right] = \sigma^2_{\boldsymbol{x}j} + \mu^2_{\boldsymbol{x}j}.
\end{aligned}
$$

Подставляем:

$$
\begin{aligned}
\ldots &= \sum_{j=1}^{M} \left(-\frac{1}{2} \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) - \frac{\mu^2_{\boldsymbol{x}j}}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) (\sigma^2_{\boldsymbol{x}j} + \mu^2_{\boldsymbol{x}j}) + \frac{\mu_{\boldsymbol{x}j}}{\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \mu_{\boldsymbol{x}j} \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(-\frac{1}{2} \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) - \frac{\mu^2_{\boldsymbol{x}j}}{2\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} + \frac{1}{2} \left(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j} + \mu^2_{\boldsymbol{x}j} - 1 - \frac{\mu^2_{\boldsymbol{x}j}}{\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) + \frac{\mu^2_{\boldsymbol{x}j}}{\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}} \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \left(-\frac{1}{2} \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) + \frac{1}{2} \sigma^2_{\boldsymbol{x}j} + \frac{1}{2} \mu^2_{\boldsymbol{x}j} - \frac{1}{2} \right) \\
&= \sum_{j=1}^{M} \frac{1}{2} \left(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j} + \mu^2_{\boldsymbol{x}j} - 1 - \log(\sigma^2_{\boldsymbol{x}j}) \right) = \mathrm{L}_{\text{reg}}.
\end{aligned}
$$

Таким образом, мы получили функции потерь для VAE:

$$\mathrm{L}_{\text{rec}} = \frac{1}{2c}\|\boldsymbol{x} - g_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{z})\|_2^2,$$
$$\mathrm{L}_{\text{reg}} = \sum_{j=1}^{M} \frac{1}{2}\left(\sigma_{\boldsymbol{x}j}^2 + \mu_{\boldsymbol{x}j}^2 - 1 - \log(\sigma_{\boldsymbol{x}j}^2)\right).$$

Также в качестве L_{rec} можно использовать кросс-энтропию с ограничениями, описанными ранее.

Осталось разобраться с последней проблемой - как пропускать градиент через операцию сэмплирования.

Reparametrization trick

Для "хороших" распределений, например, нормального, можно воспользоваться трюком с переопределением параметров:

$$\boldsymbol{z}_j \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{z}_j \mid \mu_{\boldsymbol{x}j}, \sigma_{\boldsymbol{x}j}^2) \Leftrightarrow \begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}_j \sim \mathcal{N}(0, 1) \\ \boldsymbol{z}_j = \mu_{\boldsymbol{x}j} + \sigma_{\boldsymbol{x}j}\boldsymbol{\varepsilon}_j. \end{cases}$$
$$\Rightarrow \mathbb{E}[\boldsymbol{z}_j] = \mathbb{E}[\mu_{\boldsymbol{x}j} + \sigma_{\boldsymbol{x}j}\boldsymbol{\varepsilon}_j] = \mu_{\boldsymbol{x}j} + \sigma_{\boldsymbol{x}j}\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}_j] = \mu_{\boldsymbol{x}j},$$
$$\mathbb{D}[\boldsymbol{z}_j] = \mathbb{D}[\mu_{\boldsymbol{x}j} + \sigma_{\boldsymbol{x}j}\boldsymbol{\varepsilon}_j] = \sigma_{\boldsymbol{x}j}^2\mathbb{D}[\boldsymbol{\varepsilon}_j] = \sigma_{\boldsymbol{x}j}^2.$$

Архитектура VAE

1. **Энкодер**:
   - Вход: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^D$ и $\boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{E}_{\mathrm{M}})$.
   - Выход: $\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{x}}^2 \in \mathbb{R}^M$.
2. **Декодер**:
   - Вход: $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^M$.
   - Выход: $\tilde{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^D$.

Детали реализации

Поскольку $\forall i\ 0 < \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{i}}^2 \ll 1$ - маленькие числа, которые могут привести к числовым неустойчивостям, мы можем использовать логарифмированную версию $\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{i}}^2$:

$$\log \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{i}}^2 \in \mathbb{R}^M.$$

И при репараметризации:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_j \sim \mathcal{N}(0, 1)$$
$$\boldsymbol{z}_j = \mu_{\boldsymbol{x}j} + \exp\left(\frac{1}{2}\log \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{i}}^2\right)\boldsymbol{\varepsilon}_j.$$

Сравнительный анализ методов

Общие характеристики методов

Метод	Преимущества	Недостатки	Примеры применения
PCA	Простота, интерпретируемость, вычислительная эффективность	Линейность, неустойчивость к выбросам	Визуализация данных, анализ финансовых рынков, обработка сигналов
KPCA	Нелинейность, способность моделировать сложные зависимости	Неинтерпретируемость, сложность в выборе ядра и его гиперпараметров, вычислительная сложность на больших данных, сложности с реконструкцией	Распознавание образов, биоинформатика, обработка изображений
AE	Нелинейность, устойчивость к выбросам и шуму, возможность обучения сложных зависимостей	Неинтерпретируемость, сложность в обучении, потребность в большом количестве данных	Сжатие изображений, удаление шума, обнаружение аномалий
VAE	Нелинейность, устойчивость к выбросам и шуму, интерпретируемость скрытого пространства, возможность генерации новых данных	Сложность в обучении, зависимость от качества априорного распределения (если используется более сложное распределение, чем нормальное)	Генерация изображений, моделирование молекул, обработка текстов

Сравнительный анализ методов

Сравниваемые методы представляют собой широкий спектр подходов к понижению размерности, каждый из которых имеет свои особенности, достоинства и ограничения.

1. **PCA** – это базовый метод, подходящий для линейных зависимостей в данных. Он удобен для задач, где важна интерпретируемость и визуализация. Однако, его эффективность падает, если данные имеют нелинейную структуру или содержат выбросы. PCA часто используется в качестве отправной точки для анализа, но его возможности ограничены, если требуется изучение сложных взаимосвязей между признаками.

2. **KPCA** развивает идеи PCA, позволяя анализировать данные с нелинейной структурой. Благодаря использованию ядра, KPCA способен учитывать сложные зависимости. Тем не менее, метод страдает от высокой вычислительной сложности, что делает его менее подходящим для работы с большими наборами данных. Примером применения может быть обработка изображений, где важна способность выявлять нелинейные шаблоны.
3. **Автоэнкодеры (AE)** превосходят линейные методы благодаря своей способности моделировать сложные нелинейные зависимости. Они обучаются на основе нейронных сетей и могут быть адаптированы для работы с широким спектром данных. Однако их обучение требует значительных вычислительных ресурсов и большого объема данных. Автоэнкодеры находят применение в задачах, где требуется предобработка данных перед обучением других моделей.
4. **Вариационные автоэнкодеры (VAE)** добавляют к традиционным автоэнкодерам вероятностную интерпретацию. Это делает их более подходящими для задач генерации данных, таких как создание синтетических изображений или моделирование новых молекул.

Заключение

Современные задачи анализа данных требуют эффективных методов работы с высокоразмерными пространствами. Методы понижения размерности, такие как PCA, Kernel PCA, автоэнкодеры и их вариации, предлагают широкий спектр инструментов для решения этих задач, включая упрощение анализа данных, улучшение качества моделей и сокращение вычислительных затрат.

Классические подходы, такие как PCA, остаются незаменимыми благодаря простоте, интерпретируемости и быстродействию. Нелинейные методы, в свою очередь, раскрывают новые возможности работы с более сложными структурами данных, хотя и требуют больше ресурсов и более сложной настройки. Автоэнкодеры, благодаря своей гибкости, играют ключевую роль в задачах глубокого обучения и генерации данных.

Выбор подходящего метода зависит от специфики задачи. Если требуются высокая интерпретируемость и быстрые вычисления, линейные методы предпочтительны. Для работы с нелинейной структурой данных подходят Kernel PCA.Для генерации данных и работы с латентными переменными более всего подходят автоэнкодеры и их вариации.

Таким образом, методы понижения размерности не только решают проблему "проклятия размерности", но и предоставляют мощный арсенал средств для анализа и визуализации данных, помогая исследователям и инженерам лучше понимать структуру сложных данных и принимать более информированные решения.

Полезные ссылки

Качество автоэнкодера в зависимости от количества эпох

Сверточный автоэнкодер на изображениях номеров машин

Список литературы

http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Проклятие_размерности

https://habr.com/ru/companies/wunderfund/articles/748044/

https://ru.wikipedia.org/wiki/Гиперсфера

https://stats.stackexchange.com/questions/186184/does-dimensionality-curse-effect-some-models-more-than-others

https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/linear-models

https://education.yandex.ru/handbook/ml/article/variational-autoencoder-(vae)

https://habr.com/ru/articles/799001/

https://www.youtube.com/watch?v=Y2YTeUi17FI&t=720s&ab_channel=SergeyNikolenko

"Mathematics for Machine Learning" 2020 - Marc Peter Deisenroth, A. Aldo Faisal, Cheng Soon Ong