Streamed Principal Component Analysis

Análise de Componentes Principais (PCA) é uma das ferramentas básicas em machine learning e estatística não-supervisionada. O objetivo de PCA é reduzir a dimensão dos dados mantendo uma boa parte de sua "informação estatística". Seja $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ a matriz de dados cuja iézima linha $x_i^\top := X_{i,\bullet}$ é uma amostra d-dimensional. Seja $\hat{\Sigma} := \frac{1}{n} X^\top X$ a matriz de covariância empírica. Por exemplo, a primeira componente principal é obtida resolvendo o problema de encontrar o "máximo" auto-vetor da matriz de covariância:

$$egin{array}{ll} ext{maximize} & w^ op \hat{\Sigma} w \ ext{sujeito à} & w^ op w = 1. \end{array}$$

De fato, podemos resolver um problema parecido para obter as k primeiras componentes principais:

$$egin{array}{ll} ext{maximize} & ext{tr}\left(W^ op \hat{\Sigma}W
ight) \ ext{sujeito à} & W^ op W = I_k. \end{array}$$

O problema àcima é mais precisamente chamado offline PCA já que necessita ler toda a matriz de dados X para ser resolvido. Conjunto de dados modernos possuem vetores de dados com dimensão d tão grande que por na memória toda matriz de dados pode ser computacionalmente demandante. Além disso, dados modernos podem ser obtidos via "streaming", de modo que toda a matriz de dados não é observada até o momento. Uma alternativa é streaming ou online PCA. Veja IEEE para uma aplicação de online PCA para a previsão de voltagem em sistemas de rede elétrica distribuídos.

O método de Oja consiste num método iterativo que tenta resolver PCA lendo apenas um vetor de dados em cada iteração: inicializando-se com uma matriz W_0 e escolhendo passos η_t , iteramos:

- 1. $Z_{t+1} := (I_{d \times k} + \eta_k x_t x_t^\top) W_{t,t}$ onde x_t é o t-ézimo vetor de dados.
- 2. Calcule a decomposição QR de $Z_{t+1} = Q_{t+1} R_{t+1}$.
- 3. $W_{t+1} := Q_{t+1}$.

Para entender a heurística deste método note que o gradiente da função $f(W) = \operatorname{tr}(W^{\top} \hat{\Sigma} W)$ é

$$abla f(W) = 2\hat{\Sigma}W = 2\left(rac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_ix_i^ op
ight)W.$$

Portanto, ao implementar o SGD correspondente, $2x_tx_t^{\top}W$ é uma amostra do gradiente na t-ézima iteração (conforme linha 1). As linhas 2-3 correspondem a projetar ortogonalmente Z_{t+1} no conjunto viável $C = \{W \in \mathbb{R}^{d \times k} : W^{\top}W = I_k\}$. Em conclusão, streaming PCA é o método gradiente (ascendente) estocástico projetado para resolver o problema de PCA populacional.

Começamos carregando alguns módulos necessários:

```
In [1]: #Chamando módulos necessários:
    import numpy as np
    import numpy.linalg as la
    import pandas as pd
    import seaborn as sns
    import matplotlib
    from matplotlib import pyplot as plt
    from scipy import sparse as sp
    import scipy.sparse.linalg as spla
    from time import time
```

Exercício 1: Dados sintéticos

À seguir, iremos gerar vetores de dados x_t de uma distribuição normal multivariada $N(0,\Sigma)$ cuja matriz de covariância $\Sigma\in\mathbb{R}^{d imes d}$ tem a forma

$$\Sigma = A_0 Diag(w)^2 A_0^ op + \sigma^2 I_d,$$

onde $A_0 \in \mathbb{R}^{d \times k}$ é uma matriz cujas colunas são vetores ortonormais, $w \in \mathbb{R}^k$ é um vetor com coordenadas $w_k = \frac{u_k}{u_1}$ onde $u_1 \ge \cdots \ge u_k$ são gerados independentemente de uma distribuição uniforme U(0,1) e $\sigma > 0$. Àcima Diag(w) denota a matriz diagonal cuja diagonal é preenchida com o vetor w.

Construa uma função spiked_covariance(n, d, k, sigma) com entradas n (o tamanho da amostra), d (dimensão), k e σ que retorna Σ (=cov) da forma àcima, w, A_0 e matriz de dados $X \in \mathbb{R}^{n \times d}$ cujos vetores linha são gerados de $N(0, \Sigma)$. Dica: para gerar uma matriz $n \times k$ com colunas ortonormais você pode aplicar la.qr() a uma matriz $n \times k$ cujas entradas são iid U(0, 1). Veja as funções np.random.rand(), np.sort() e np.random.multivariate_normal().

```
In [2]: #Escreva código aqui
def spiked_covariance(n:int, d:int, k:int, sigma:float) -> tuple[np.ndarray, np.ndarray, np.ndarray, np.ndarray]:
    A0 = la.qr(np.random.rand(d, k))[0]
    u = np.sort(np.random.rand(k))[::-1]
    w = u / u[0]
    Sigma = A0 @ np.diag(w**2) @ A0.T + sigma**2 * np.eye(d)
    X = np.random.multivariate_normal(np.zeros(d), Sigma, n)
    return Sigma, w, A0, X
```

```
In [ ]: #Exemplo:
    n = 500
    d = 5
    k = 2
```

```
sigma = 10*1e-2
        cov, w, A0, X = spiked covariance(n,d,k,sigma)
        cov[:6,:6], w[:6], A0[:6,:6], X[:6,:6]
Out[]: (array([[0.30346724, 0.30332387, 0.23835301, 0.18441119, 0.11053343],
                [0.30332387, 0.35085478, 0.1944905 , 0.19678209, 0.01883206],
                [0.23835301, 0.1944905, 0.30197921, 0.13806056, 0.27076777],
                [0.18441119, 0.19678209, 0.13806056, 0.12727719, 0.04790287],
                [0.11053343, 0.01883206, 0.27076777, 0.04790287, 0.38457761]]),
         array([1.
                          , 0.64664984]),
         array([[-0.52184755, -0.22485767],
                [-0.49499123, -0.47874113],
                [-0.50803489, 0.28464331],
                [-0.31789586, -0.19694655],
                [-0.35142794, 0.77487819]]),
         array([[ 0.72414355, 0.64940176, 0.28037007, 0.301704 , -0.33350207],
                [-0.3305817, -0.36223631, 0.12527922, -0.09995934, 0.64302417],
                [-0.23571263, -0.30629497, 0.2309853, -0.20124834, 0.19240161],
                [-1.01307993, -1.13952975, -0.95772684, -0.5638142, -0.66110348]
                [1.02320777, 1.2783429, 0.23883778, 0.69338582, -1.02569667],
                [-0.51367324, -0.59847424, -0.30308659, -0.26843794, 0.19131149]]))
```

Exercício 2: Método de Oja

Construa uma função Oja(X,cov, k,c,lr_type,random) que toma como entradas a matriz de dados X , a matriz covariância cov , o número de componentes principais k , número positivo c , Boolean lr_type onde o passo é $\eta_t = \frac{c}{t}$ se lr_type=False e $\eta_t = \frac{c}{\sqrt{t}}$ se lr_type=True e Boolean random onde o ponto inicial W_0 é a origem se random=False e randomizado se random=True . Tal função deve aplicar o método de Oja e retornar a sequência $\|W_t - U_{\bullet,k}\|_F^2$ e o último iterado W_n . Aqui, $U_{\bullet,k}$ é a matriz $d \times k$ cujas colunas são os k primeiros auto-vetores de Σ .

NOTA: se random=True , inicialize o método de Oja tomando W_0 como o fator Q da fatorização QR de uma matriz d imes k cujas entradas são iid N(0,1).

```
In [4]: #Escreva código aqui
def Oja(X:np.ndarray, cov:np.ndarray, k:int, c:float, lr_type:bool, random:bool) -> tuple[list[float], np.ndarray]:
    n, d = X.shape
    errors = list()
    eigvals, eigvecs = la.eigh(cov)
    U_k = eigvecs[:, -k:]
    if random:
        W = la.qr(np.random.randn(d, k))[0]
    else:
        W = np.zeros((d, k))
```

```
for t in range(1, n + 1):
    x_t = X[t - 1].reshape(-1, 1)

if lr_type:
    eta_t = c / np.sqrt(t)
else:
    eta_t = c / t

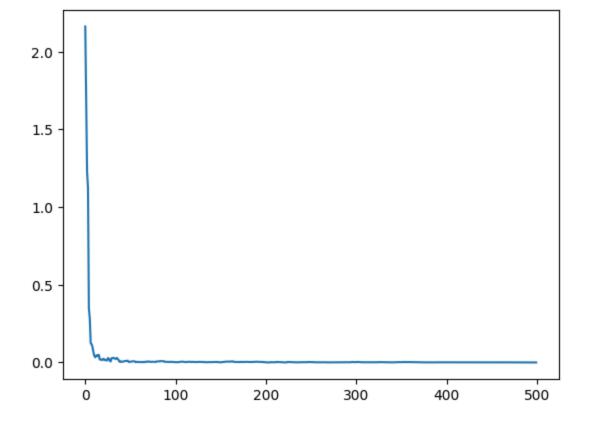
Z = W + eta_t * (x_t @ x_t.T @ W)

W = la.qr(Z)[0]
    error = la.norm(W @ W.T - U_k @ U_k.T, 'fro') ** 2
    errors.append(float(error))

return errors, W

#Exemplo:
# Para F muito grande oscila, para F muito pequeno fica constante e maior do que deveria
F = 10*1e+1
f1 = 0ja(X, cov, k, c=F*sigma, lr_type=False, random=False)
```

```
In [5]: #Exemplo:
    # Para F muito grande oscila, para F muito pequeno fica constante e maior do que deveria
    F = 10*1e+1
    f1 = Oja(X, cov, k, c=F*sigma, lr_type=False, random=False)
    error_Oja = f1[0]
    plt.plot(error_Oja)
    plt.show()
```



Pergunta:

Tomando:

```
n = 500 d = 5 k = 2 sigma = 10*1e-2 lr_type=False random=False plote ||W_t - U_{\bullet,k}||_F^2 em função do número de iterações t para F=10*1e-2 , F=10*1e+1 , F=10*1e+2 , F=10*1e+5 . Qual a sua interpretação?
```

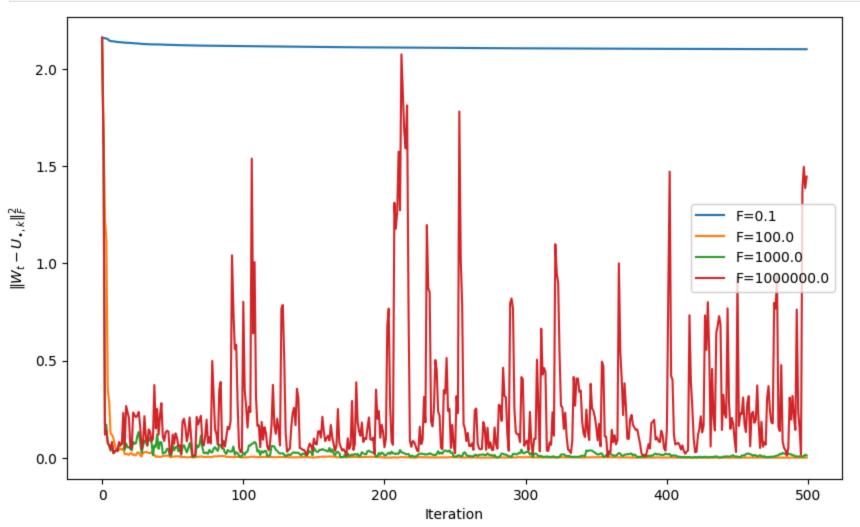
```
In [6]: n = 500
d = 5
k = 2
sigma = 10*1e-2
lr_type = False
random = False

F_values = [10*1e-2, 10*1e+1, 10*1e+2, 10*1e+5]

plt.figure(figsize=(10, 6))
F_erros = list()
```

```
for F in F_values:
    errors, _ = 0ja(X, cov, k, c=F*sigma, lr_type=lr_type, random=random)
    F_erros.append(errors)
    plt.plot(errors, label=f'F={F}')

plt.xlabel('Iteration')
plt.ylabel(r'$\Vert W_t - U_{\bullet,k}\Vert^2_F$')
plt.legend()
plt.show()
```

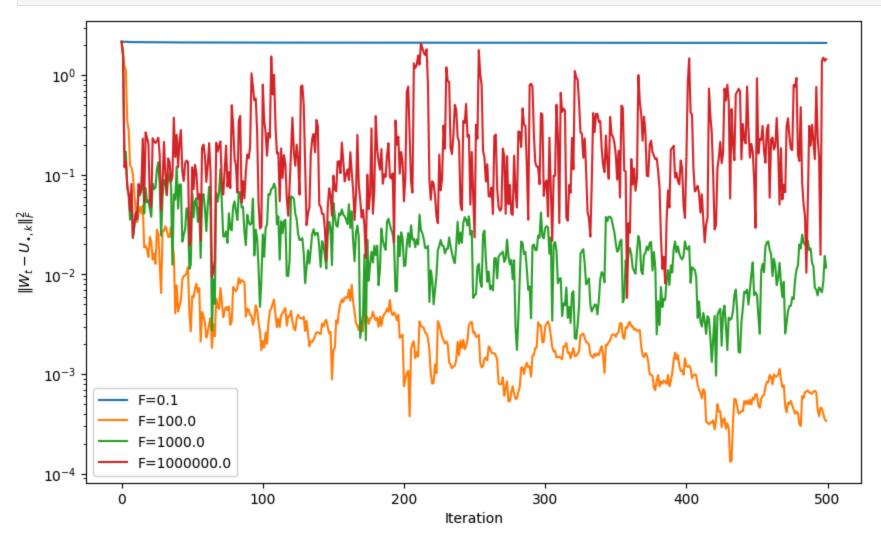


```
In [7]: plt.figure(figsize=(10, 6))

for i in range(len(F_erros)):
    plt.plot(F_erros[i], label=f'F={F_values[i]}')

plt.xlabel('Iteration')
```

```
plt.ylabel(r'$\Vert W_t - U_{\bullet,k}\Vert^2_F$')
plt.yscale('log')
plt.legend()
plt.show()
```



Após realizar algumas execuções, foi perceptível como um F pequeno, como 0.1 atrapalha a convergência do problema, fazendo com que a mudança entre uma iteração apra outra seja pequena, já com valores de F entre 100 e 1000, a estabilidade da convergência aparenta ser bem maior, cheganod a ótimos resultados em 500 iterações, por fim, um valor de F muito alto como 1000000 deixa uma convergência instável, divergindo muito entre valores baixos e altos, isto indica que achar um F ideal pode mudar todo o problema.

Exercício 3: AdaOja-Norm

O método de Oja é bastante sensível à calibração do passo η_t . Iremos implementar uma versão adaptativa do método de Oja baseado no algoritmo Adagrad-Norm. Inicializando-se com uma matriz W_0 e escolhendo números positivos $\eta>0$ e $b_0>0$, iteramos:

1. Na t-ézima iteração,

$$Z_{t+1} := \left(I_{d imes k} + rac{\eta}{\sqrt{b_0^2 + \sum_{j=1}^t \|x_j x_j^ op W_j\|_F^2}} x_t x_t^ op
ight)W_t,$$

- 2. Calcule a decomposição QR de $Z_{t+1} = Q_{t+1}R_{t+1}$.
- 3. $W_{t+1} := Q_{t+1}$.

Construa uma função AdaOja(X, cov, k, eta, b0, random) que toma como entradas a matriz de dados X, a matriz covariância cov, o número de componentes principais k, número positivos eta e b0 e Boolean random onde o ponto inicial W_0 é a origem se random=False e randomizado se random=True. Tal função deve aplicar o método AdaOja-Norm àcima e retornar a sequência $\|W_t - U_{\bullet,k}\|_F^2$ e o último iterado W_n . Aqui, $U_{\bullet,k}$ é a matriz $d \times k$ cujas colunas são os k primeiros auto-vetores de Σ .

NOTA: se random=True , inicialize o método AdaOja tomando W_0 como o fator Q da fatorização QR de uma matriz $d \times k$ cujas entradas são iid N(0,1).

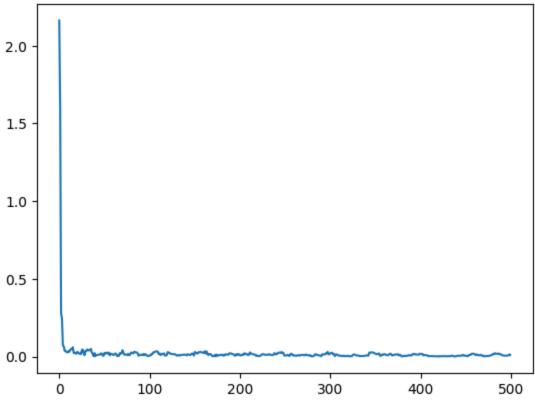
```
In [8]: #Escreva código aqui
        def AdaOja(X:np.ndarray, cov:np.ndarray, k:int, eta:float, b0:float, random:bool) -> tuple[list[float], np.ndarray]:
            n, d = X.shape
            errors = list()
            eigvals, eigvecs = la.eigh(cov)
            U_k = eigvecs[:, -k:]
            if random:
                 W = la.qr(np.random.randn(d, k))[0]
            else:
                W = np.zeros((d, k))
            sum grad norms = 0
            for t in range(1, n + 1):
                x_t = X[t - 1].reshape(-1, 1)
                grad = x_t @ x_t.T @ W
                sum grad norms += la.norm(grad, 'fro') ** 2
                eta_t = eta / np.sqrt(b0 ** 2 + sum_grad_norms)
                Z = W + eta t * grad
                W = la.qr(Z)[0]
                error = la.norm(W @ W.T - U k @ U k.T, 'fro') ** 2
```

```
return errors, W

In [9]: #Exemplo:
F = 10*1e+1
f2 = AdaOja(X, cov, k, eta=F*sigma, b0=1e-5, random=False)

error_AdaOja = f2[0]

plt.plot(error_AdaOja)
plt.show()
```



Exercício 4: AdaOja-Coordinate

errors.append(float(error))

Alternativamente, podemos implementar a versão baseada no Adagrad-Coordinate, a iteração é implementada coordenada (semelhante ao método Adam):

1. Na t-ézima iteração,

$$egin{align} G_t &:= x_t x_t^ op W_t, \ b_t[j] &:= \sqrt{b_0^2 + \sum_{j=1}^t \|G_t[:,j]\|_2^2}, \ Z_{t+1}[:,j] &:= Z_t[:,j] + rac{\eta}{b_t[j]} G_t[:,j]. \end{gathered}$$

- 2. Calcule a decomposição QR de $Z_{t+1} = Q_{t+1} R_{t+1}$.
- 3. $W_{t+1} := Q_{t+1}$.

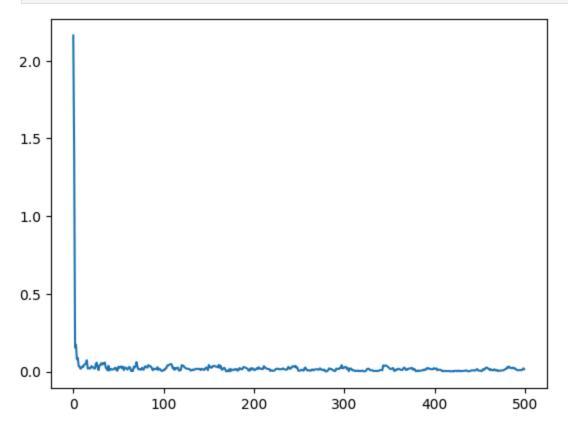
Construa uma função AdaOja_Coord(X, cov, k, eta, b0, random) que toma como entradas a matriz de dados X, a matriz covariância cov, o número de componentes principais k, número positivos eta e b0 e Boolean random onde o ponto inicial W_0 é a origem se random=False e randomizado se random=True. Tal função deve aplicar o método AdaOja-Coordindate àcima e retornar a sequência $\|W_t - U_{\bullet,k}\|_F^2$ e o último iterado W_n . Aqui, $U_{\bullet,k}$ é a matriz $d \times k$ cujas colunas são os k primeiros auto-vetores de Σ .

NOTA: se random=True , inicialize o método AdaOja-Coord tomando W_0 como o fator Q da fatorização QR de uma matriz d imes k cujas entradas são iid N(0,1).

```
In [10]: #Escreva código aqui
         def AdaOja Coord(X:np.ndarray, cov:np.ndarray, k:int, eta:float, b0:float, random:bool) -> tuple[list[float], np.ndarray]:
             n, d = X.shape
             errors = list()
             eigvals, eigvecs = la.eigh(cov)
             U_k = eigvecs[:, -k:]
             if random:
                 W = la.qr(np.random.randn(d, k))[0]
             else:
                 W = np.zeros((d, k))
             b t = (b0 * np.ones(k)).reshape(-1, 1)
             for t in range(1, n + 1):
                 x_t = X[t - 1].reshape(-1, 1)
                 G t = x t @ x t.T @ W
                 for j in range(k):
                     b_t[j] = np.sqrt(b_t[j] ** 2 + la.norm(G_t[:, j]) ** 2)
                     W[:, j] += (eta / b_t[j]) * G_t[:, j]
                 W = la.qr(W)[0]
                 error = la.norm(W @ W.T - U_k @ U_k.T, 'fro') ** 2
                 errors.append(float(error))
             return errors, W
```

```
In [11]: #Exemplo:
    F = 10*1e+1
    f2 = AdaOja_Coord(X, cov, k, eta=F*sigma, b0=1e-5, random=False)
    error_AdaOja_Coord = f2[0]

plt.plot(error_AdaOja_Coord)
    plt.show()
```



Dados CIFAR-10

Iremos utilizar os dados CIFAR-10. Ele consiste de 60mil imagens 32x32 com 10 classes. Não usaremos os labels e usaremos apenas os 5 primeiros batches de 50mil imagens com 10mil imagens cada um. Estes correspondem ao dados de treinamento ("training data") com arquivos:

- 1. data_batch_1
- 2. data_batch_2
- 3. data_batch_3
- 4. data_batch_4

```
5. data batch 5
```

Estes estão na pasta onde este notebook está salvo. Maiores informações sobre como ler os dados CIFAR-10 veja vídeo e aplicações de redução de dimensão via PCA no CIFAR-10 em https://www.kaggle.com/code/adtysregita/pca-application-using-cifar10-dataset.

À seguir iremos ler os dados e salvá-los como uma matriz de dados X. As imagens estão decodificadas em arquivo texto, portanto temos que ler os dados e transformá-los em imagens. Note que cada linha corresponderá a uma imagem 32x32 *vetorizada*. Mais precisamente, cada linha tem dimensão 3072 correspondente a 3 imagens 32x32, cada uma com os tons de vermelho, azul e verde. Este formato é suficiente para aplicarmos PCA. Ao usarmos todos 5 batches, leva-se um tempo demorado para o método de Oja processar todas as 50000 iterações. Portanto, iremos dar a opção de escolher os m primeiros batches para colocar da matriz de dados X.

```
In [12]: # Criando uma função para ler os dados e transformá-los em imagens, salvas em um dicionário python:
         def unpickle(file):
             import pickle
             with open(file, 'rb') as fo:
                 dict = pickle.load(fo, encoding='bytes')
             return dict
In [13]: #Exemplo:
         unpickle('./datasets/data_batch_2')[b'data'].shape, unpickle('./datasets/data_batch_2')[b'data']
Out[13]: ((10000, 3072),
          array([[ 35, 27, 25, ..., 169, 168, 168],
                  [ 20, 20, 18, ..., 111, 97, 51],
                 [116, 115, 155, ..., 18, 84, 124],
                  . . . ,
                  [127, 139, 155, \ldots, 197, 192, 191],
                 [190, 200, 208, \ldots, 163, 182, 192],
                 [177, 174, 182, ..., 119, 127, 136]], dtype=uint8))
In [14]: # Colocando m batches em uma única matriz de dados X e escolhendo k:
         db = []
         m = 5
         k = 2
         for i in range(1, m+1):
             db.append(unpickle('./datasets/data_batch_' + str(i))[b'data'])
         CIFAR = np.vstack(db)
         # Centralizando os dados:
         X = CIFAR - CIFAR.mean(axis=0)
```

Exercício 6: Método de Oja em CIFAR-10

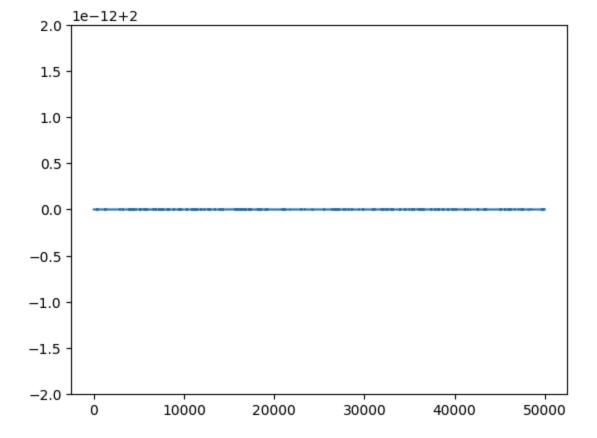
Construa uma função Oja_real(X,k,c,lr_type,random) que toma como entradas a matriz de dados X , o número de componentes principais k , número positivo c , Boolean lr_type onde o passo é $\eta_t = \frac{c}{t}$ se $lr_type=False$ e $\eta_t = \frac{c}{\sqrt{t}}$ se $lr_type=True$ e Boolean random onde o ponto inicial W_0 é a origem se random=False e randomizado se random=True . Tal função deve aplicar o método de Oja e retornar a sequência $\|W_t\|_F^2$ e o último iterado W_n .

NOTA: se random=True , inicialize o método de Oja tomando W_0 como o fator Q da fatorização QR de uma matriz $d \times k$ cujas entradas são iid N(0,1).

```
In [15]: #Escreva código aqui
         def Oja_real(X:np.ndarray, k:int, c:float, lr_type:bool, random:bool) -> tuple[list[float], np.ndarray]:
             n, d = X.shape
             errors = list()
             if random:
                 W = la.qr(np.random.randn(d, k))[0]
             else:
                 W = np.zeros((d, k))
             for t in range(1, n + 1):
                 x_t = X[t - 1].reshape(-1, 1)
                 if lr_type:
                     eta_t = c / np.sqrt(t)
                 else:
                     eta_t = c / t
                 Z = W + eta_t * (x_t @ x_t.T @ W)
                 W = la.qr(Z)[0]
                 error = la.norm(W, 'fro') ** 2
                 errors.append(float(error))
             return errors, W
```

```
In [16]: #Exemplo:
    ans1 = Oja_real(X, k, c=10*1e-1, lr_type=False, random=False)
    error_Oja_real = ans1[0]

plt.plot(error_Oja_real)
    plt.show()
```



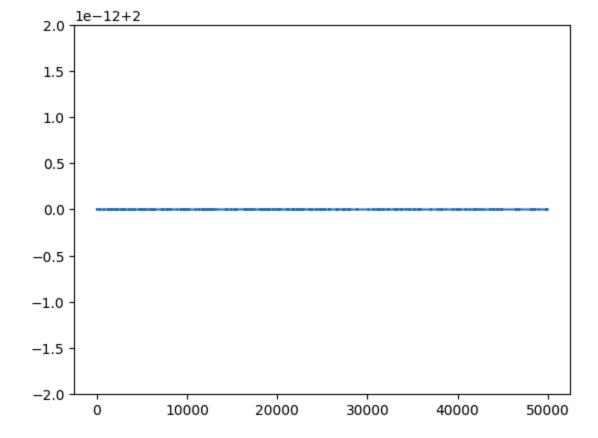
Exercício 7: AdaOja-Norm em CIFAR-10

Construa uma função AdaOja_real(X, k, eta, b0, random) que toma como entradas a matriz de dados X, o número de componentes principais k, número positivos eta e b0 e Boolean random onde o ponto inicial W_0 é a origem se random=False e randomizado se random=True . Tal função deve aplicar o método AdaOja-Norm àcima e retornar a sequência $\|W_t\|_F^2$ e o último iterado W_n .

NOTA: se random=True , inicialize o método AdaOja tomando W_0 como o fator Q da fatorização QR de uma matriz d imes k cujas entradas são iid N(0,1).

```
sum_grad_norms = 0
   for t in range(1, n + 1):
       x_t = X[t - 1].reshape(-1, 1)
       grad = x_t @ x_t.T @ W
       sum_grad_norms += la.norm(grad, 'fro') ** 2
       eta_t = eta / np.sqrt(b0 ** 2 + sum_grad_norms)
       Z = W + eta_t * grad
       W = la.qr(Z)[0]
       error = la.norm(W, 'fro') ** 2
       errors.append(float(error))
   return errors, W
ans2 = AdaOja_real(X, k, eta=10*1e-1, b0=1e-5, random=False)
error_AdaOja_real = ans2[0]
```

```
In [18]: #Exemplo:
         plt.plot(error_AdaOja_real)
         plt.show()
```



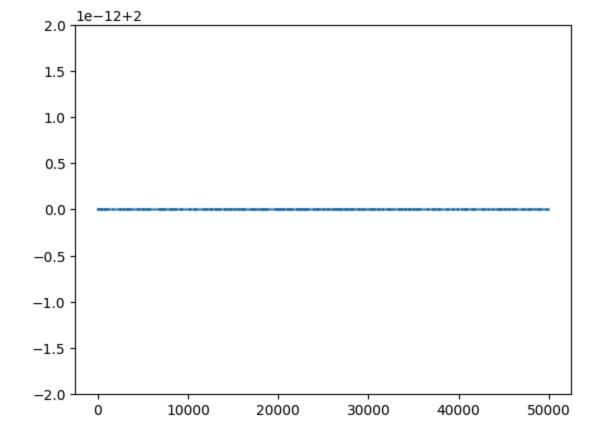
Exercício 8: AdaOja-Coord em CIFAR-10

Construa uma função AdaOja_Coord_real(X, k, eta, b0, random) que toma como entradas a matriz de dados X, o número de componentes principais k, número positivos eta e b0 e Boolean random onde o ponto inicial W_0 é a origem se random=False e randomizado se random=True . Tal função deve aplicar o método AdaOja-Coordindate àcima e retornar a sequência $\|W_t\|_F^2$ e o último iterado W_n .

NOTA: se random=True , inicialize o método AdaOja-Coord tomando W_0 como o fator Q da fatorização QR de uma matriz $d \times k$ cujas entradas são iid N(0,1).

plt.plot(error_AdaOja_Coord_real)

plt.show()



Exercício 9:

Implemente num mesmo gráfico os erros $\|W_k\|_F^2$ de cada método em CIFAR-10 em função no número de iterações.

```
In [21]: #Escreva código aqui

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(error_Oja_real, label='Oja')
plt.plot(error_AdaOja_real, label='AdaOja-Norm')
plt.plot(error_AdaOja_Coord_real, label='AdaOja-Coord')
plt.xlabel('Iteration')
plt.ylabel(r'$\Vert W_t \Vert^2_F$')
plt.legend()
plt.show()
```

