Робастные методы сжатия данных

Парамонов Всеволод Антонович

2024

Цели

- Изучение метода главных компонент и робастных оценок корреляционных матриц
- Проведение компьютерного моделирования, имитирующего коррелированные данные с различными типами засорения
- Подбор больших публичных датасетов для анализа сжатия
- Сжатие данных с помощью метода главных компонент
- Построение метрик, оценивающих качество сжатия данных

Метод главных компонент

Понижение размерности

- процесс сокращения количества измерений (признаков) с сохранением наиболее значимой информации о структуре данных

$$f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^k, \; k < d$$

Мотивы понижения размерности

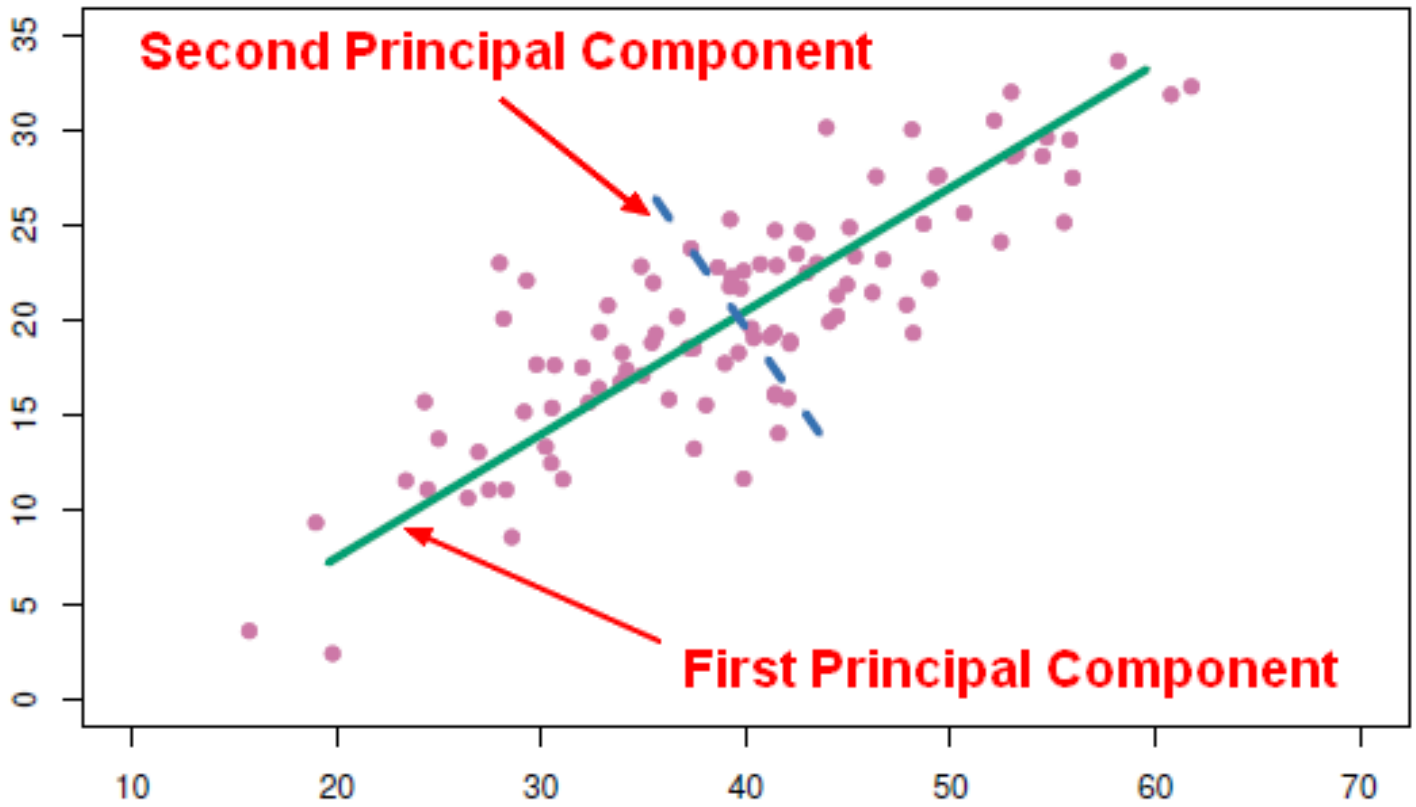
- Сжатие данных для более эффективного хранения информации
- Визуализация и интерпретация данных
- Уменьшение вычислительных затрат (например, в задачах регрессии)
- Борьба с мультиколлинеарностью

Метод главных компонент

МГК (PCA)

- линейное преобразование исходных признаков, направленная на поиск новых ортогональных осей таким образом, чтобы проекция исходных данных на эти оси имела максимальную дисперсию

Метод главных компонент



Метод главных компонент

Пусть $X = [X_1, X_2, \ldots, X_k] \in R^{n \times k}$ - матрица объекты-признаки, где $X_i \in \mathbb{R}^n$. Главной задачей является переход от матрицы X к матрице $Z \in \mathbb{R}^{n \times m}$, причем $m < k$. Далее будем считать, что данные в матрице X центрированы и стандартизированы

Также необходима восстанавливаемость исходной матрицы признаков с приемлемой точностью. Таким образом $\exists U \in \mathbb{R}^{k \times m}$ (U - ортонормированная матрица, $U^T U = U U^T = I$), что матрица ZU^T является неплохим приближением матрицы X

МГК. Постановка задачи

Максимизация дисперсии

Предположим, что признак Z_1 линейно выражается через все признаки матрицы X. Тогда:

$$Z_1 = w_{11}X_1 + \dots w_{1k}X_k = Xw_1, \sum_{i=1}^{k} w_{1i}^2 = 1$$

Тогда задача выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} ||Z_1||^2 = w_1^T X^T X w_1 \to \max_{w_1} \\ w_1^T w_1 = 1 \end{cases}$$

МГК. Постановка задачи

Максимизация дисперсии

Выпишем Лагранжиан:

$$\mathbb{L} = w^T X^T X w - \lambda(w^T w - 1) \to max$$

$$\frac{\partial \mathbb{L}}{\partial w} = 2X^T X w - 2\lambda w = 0$$

$$X^T X w = \lambda w$$

Подставляя решение в функцию Лагранжа получается:

$$\mathbb{L} = \lambda w^T w - \lambda(w^T w - 1) = \lambda$$

Итого: максимальное значение дисперсии компоненты достигается при использовании собственного вектора, которому соответствует максимальное собственное значение, в качестве компоненты

МГК

SVD

Допустим, что пока что не происходит сокращения размерности, тогда:

$$Z = XU \Rightarrow X = ZU^T$$

Разложим матрицу X с помощью SVD:

$$X = \underbrace{VD}_{Z} U^T = ZU^T$$

Тогда матрица ковариаций для главных компонент будет выглядеть следующим образом:

$$Z^T Z = U^T X^T XU = U^T UD^T V^T VDU^T U = D^T D$$

МГК

SVD

Получилось так, что ковариационная матрица $Z^T Z$ - диагональная матрица, у которой компоненты не коррелированны, а на диагонали находятся дисперсии данных компонент

МГК

Ошибка восстановления

Теперь представим, что мы берем не все компоненты, а лишь m штук. Тогда ошибка будет выглядеть следующим образом:

$$\epsilon = ||XU - X\hat{U}||_F^2,$$

где $\hat{U}$ - матрица, у которой занулены столбцы, начиная с $m+1$. Домножим выражение на U^T, поскольку норма Фробениуса не зависит от домножения на ортогональную матрицу

$$\epsilon = ||XUU^T - X\hat{U}U^T||_F^2$$

МГК

Ошибка восстановления

Разложим матрицу X через SVD и подставим в выражение:

$$\epsilon = ||VDU^T - V\hat{D}U^T||_F^2 = ||V(D - \hat{D})U^T||_F^2$$

D и $\hat{D}$ - диагональные матрицы $\Rightarrow$ на диагонали матрицы $(D - \hat{D}) = D^*$ находятся элементы $(0, \dots, \sqrt{\lambda_{m+1}}, \dots)$. Тогда:

$$\epsilon = ||UD^*V^T||_F^2 = tr(UD^*V^TVD^{*T}U) = tr(D^2) = \sum_{i=m+1}^{k} \lambda_i^2$$

Итого: Ошибка будет соответствовать сумме квадратов собственных значений, которым соответствуют не использовавшиеся компоненты

Недостатки МГК

- Сложность вычисления главных компонент при большом количестве признаков. Данная проблема решается **степенным методом** нахождения собственных значений и собственных векторов
- МГК способен находить только линейные подпространства исходного пространства, которые сохраняют дисперсию исходных данных с высокой точностью. Таким образом от обычного МГК можно перейти к **ядровому МГК**
- МГК чувствителен к выбросам данных и зависит от стандартизации

Ядровый МГК

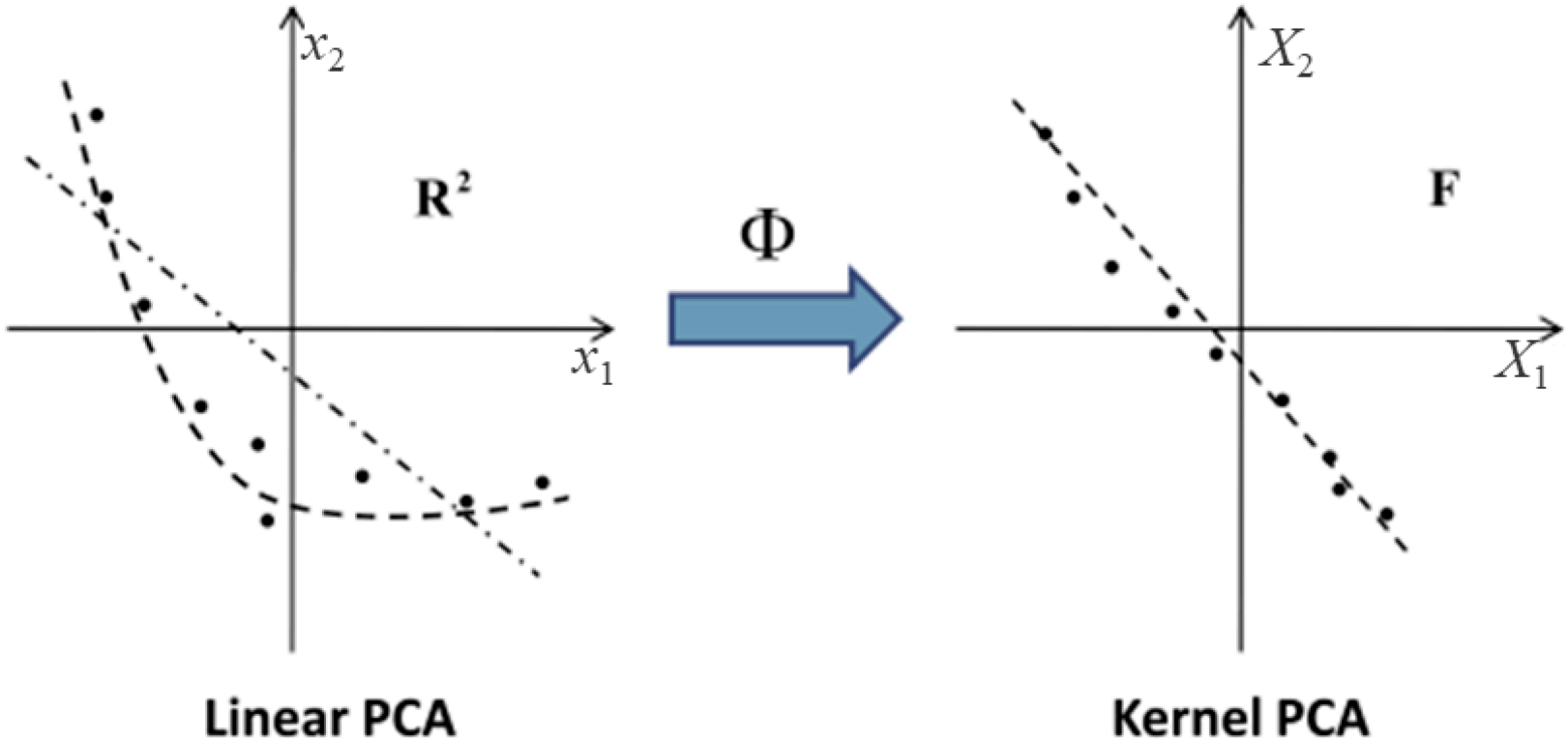
Идея ядрового МГК заключается в применении нелинейных преобразований к векторам признаков, которое сделало бы линейные методы более мощными

Вместо обычного скалярного произведения $< x, y >$ в пространстве $\mathbb{R}^n$ в обычном МГК теперь используется следующее скалярное произведение:

$$K(x, y) =< \phi(x), \phi(y) >,$$

где $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^N$, $N >> n$. Также для применения функции ϕ нет необходимости знать явный вид функции

Ядровый МГК



Ядровый МГК

В качестве функции ϕ можно использовать следующие функции / ядра:

- Линейное ядро: $K(x, y) = xy$
- Гауссово ядро: $K(x, y) = exp(-\frac{||x-y||^2}{2\sigma^2})$
- Полиномиальное ядро: $K(x, y) = (\gamma xy + c)^d$
- ...

Выбор количества компонент

Установление порога

Дисперсиями главных компонент являются соответствующие собственные значения ковариационной матрицы стандартизированных величин, упорядоченные по убыванию. Тогда общая доля дисперсии, которую покрывают l компонент:

$$\frac{\sum_{i=1}^{l} \lambda_{(i)}}{\sum_{j=1}^{k} \lambda_j}$$

После того как был установлен порог t (удовлетворительная доля дисперсии, покрываемая главными компонентами), подбирается такое l, чтобы значение общей доли было больше порога

Выбор количества компонент

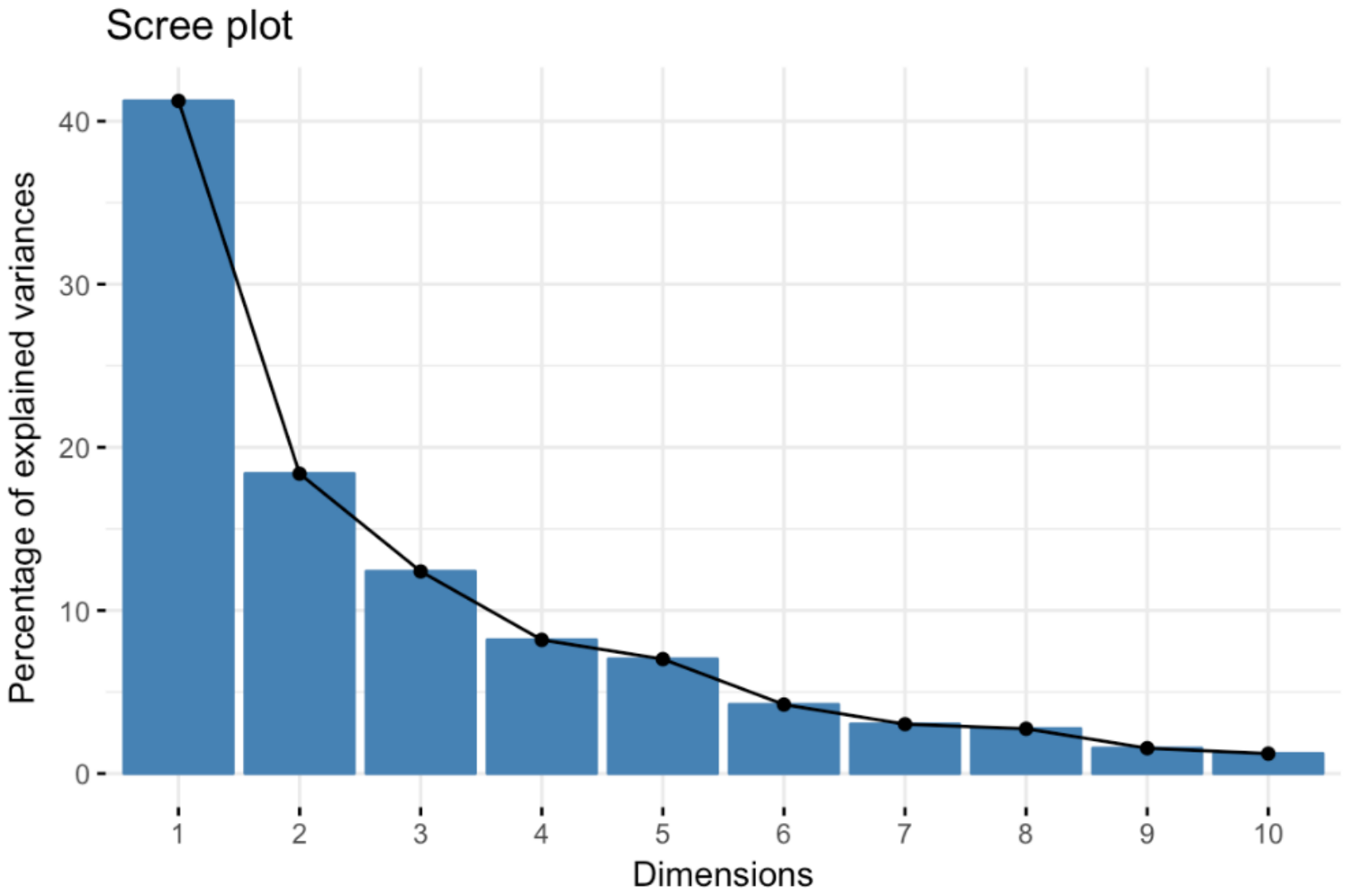
Критерий Кайзера

В соответствии с правилом Кайзера, следует выбирать те компоненты, у которых собственное значение больше 1

$$\Lambda = [c_i, c_{i+1}, ...] \; \forall \; \lambda_i \geq 1$$

Где Λ - матрица с выбранными главными компонентами

Выбор количества компонент



Оценка качества сжатия данных

Для сравнения качества между моделями сжатия многомерных данных используется показатель:

$$e = \frac{\sum_{i=1}^{m} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda}_i} - 1,$$

где λ - собственное значение истинной корреляционной матрицы, λ - собственное значение оцененной корреляционной матрицы

Идеальным значением показателя будет 0, поэтому в дальнейшем можно рассматривать модуль данного показателя

Робастные оценки корреляционных матриц

Корреляция Пирсона

$$\rho(X, Y) = \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})(Y_i - \overline{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2(Y_i - \overline{Y})^2}}$$

Как известно, среднее не очень устойчиво к выбросам, как и дисперсия. Поэтому данный способ подсчета корреляции требует модернизации

Корреляция Спирмена

- Для каждого значения признака присваивается ранг от наименьшего к наибольшему. Если же встречаются повторяющиеся признаки, то им присваивается среднее значение ранга
- Для каждой пары значений признаков вычисляется квадрат разности рангов

$$d_i = (rang_i^{X_j} - rang_i^{X_k})^2$$

Где j, k - номера признаков, i - номер значений признаков

- Расчет значения корреляции

$$\rho(d_i) = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^{n} d_i}{n(n^2 - 1)}$$

Медианная корреляция

Med_X, Med_Y — медианы X и Y соответственно

$$MAD(X) = Med(|X_i - Med(X_i)|)$$

$$MAD(Y) = Med(|Y_i - Med(Y_i)|)$$

$$Covmed(X, Y) = < (X - Med_X), (Y - Med_Y) >$$

$$\rho(X, Y) = \frac{Covmed(X, Y)}{MAD(X) \times MAD(Y)}$$

MAD

Данный способ основывается на методе подсчета ковариации следующим образом:

$$cov(x, y) = \frac{VAR(\alpha x + \alpha y) - VAR(\alpha x - \alpha y)}{4\alpha\beta}$$

При подстановке $\alpha = \sigma_x, \beta = \sigma_y$ получается следующее равенство:

$$\rho(x, y) = \frac{VAR(\alpha x + \beta y) - VAR(\alpha x - \beta y)}{4}$$

Также утверждается, что можно использовать MAD-оценки в качестве робастных оценок дисперсии

Работа с синтетическими данными

Генерация данных

Сгенерируем данные из следующих распределений для проведения экспериментов с целью оценки качества робастности оценок корреляционных матриц и сжатия многомерных данных:

- **Выборка 1: многомерное нормальное распределение**

$$(X)_{i=1}^{n} \sim \mathbb{N}(0, K)$$

- **Выборка 2: многомерное распределение** Тьюки

$$(X)_{i=1}^{n} \sim (1-\delta)\mathbb{N}(0, K) + \delta\mathbb{N}(0, c^2 K)$$

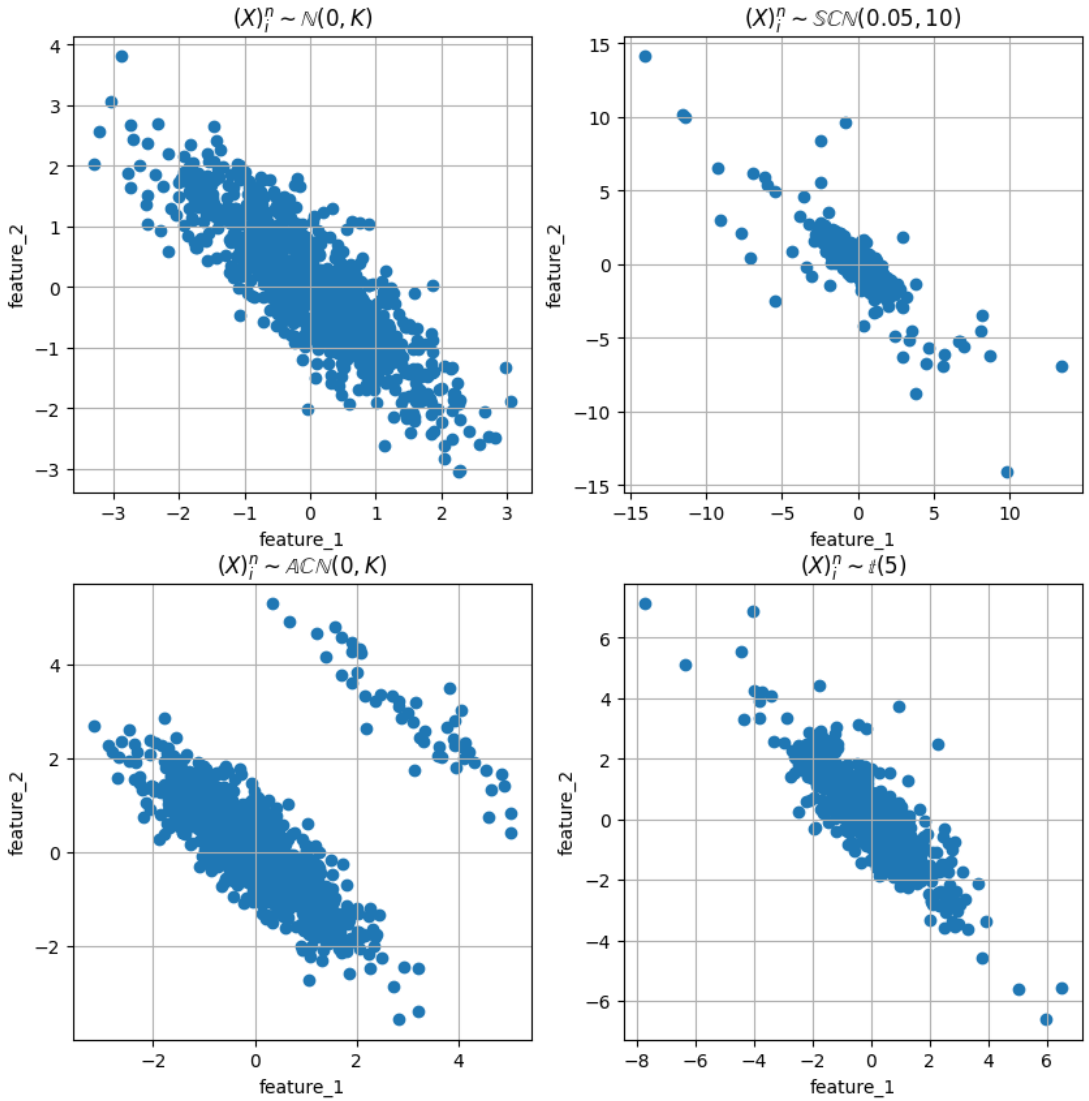
- **Выборка 3: многомерное распределение ACN**

$$(X)_{i=1}^{n} \sim (1-\delta)\mathbb{N}(0, K) + \delta\mathbb{N}(\mu, c^2 K)$$

- **Выборка 4: многомерное распределение Стъюдента**

$$(X)_{i=1}^{n} \sim t(df)$$

Визуализация данных



Оценка робастности корреляционных функций

Для оценки робастности k раз сгенерируем выборку из некоторого распределения и оценим корреляционную матрицу. В качестве метрики схожести корреляционных матриц (истинной и сгенерированной) будем использовать евклидово расстояние между векторами, представляющими верхний треугольник (без диагональных элементов) матриц корреляции

Итоговой оценкой робастности будет усредненное значение евклидова расстояния по k генерациям

Сравнение результатов оценивания для корреляционных функций

	Pearson	Spearman	MAD	MED
MultiNormal	0.194569	0.206468	0.2044745	0.202301
ACN	0.189884	0.213939	0.214378	0.214657
SCN	0.196002	0.219705	0.213655	0.200005
t	0.271562	0.200243	0.241344	0.280765

Таблица: Средние "ошибки"оценок корреляционных матриц

Оценка разброса значений корреляционных функций

Сгенерируем для каждого распределения k выборок и для каждой из них посчитаем корреляционную матрицу. Соберем в матрицу все получившиеся оценки, где в каждой строке будут находиться значения верхнего треугольника корреляционной матрицы.

Далее посчитаем стандартное отклонение каждого столбца матрицы и посчитаем квадрат евклидовой нормы получившегося вектора, что и будет являться мерой разброса корреляционной функции

Проверка робастности корреляционных функций

	Pearson	Spearman	MAD	MED
MultiNormal	0.043312	0.05319	0.037553	0.052439
ACN	0.046013	0.043703	0.043022	0.041592
SCN	0.047638	0.045243	0.049953	0.040631
t	0.142757	0.101361	0.116142	0.105153

Таблица: Дисперсии оценок корреляционных матриц

Итоги. Выбор корреляционной функции

Показатели отражают, что следует выбрать корреляцию Пирсона в качестве функции для оценки корреляционных матриц, поскольку данная функция имеет маленький разброс и ошибку относительно других функций оценки корреляции

Сравнение МГК с разными корреляционными функциями

По аналогии проведем несколько экспериментов, где для каждого набора данных и для каждой корреляционной функции посчитаем главные компоненты и возьмем первые 3 компоненты и посчитаем разброс проекций исходных данных на эти компоненты и показатель для сравнения моделей МГК (слайд 22):

$$e = \frac{\sum_{i=1}^{m} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{m} \hat{\lambda}_i} - 1$$

Сравнение дисперсий компонент

	Pearson	Spearman	MAD	MED
MultiNormal	1.866048	1.865855	1.8659835	1.866048
ACN	1.85659	1.855636	1.8562225	1.856589
SCN	1.870253	1.867068	1.8686743	1.870245
t	1.873158	1.872836	1.8729786	1.873155

Таблица: Дисперсии главных компонент

Сравнение моделей по показателю близости истинных и оцененных собственных значений корреляционной матрицы

	Pearson	Spearman	MAD	MED
MultiNormal	0.00138	0.007972	0.004874	0.001436
ACN	0.006481	0.018106	0.015478	0.006842
SCN	0.000872	0.022337	0.0149565	0.001176
t	0.002421	0.0063	0.00356	0.00222

Таблица: Отклонение от истинной корреляционной матрицы

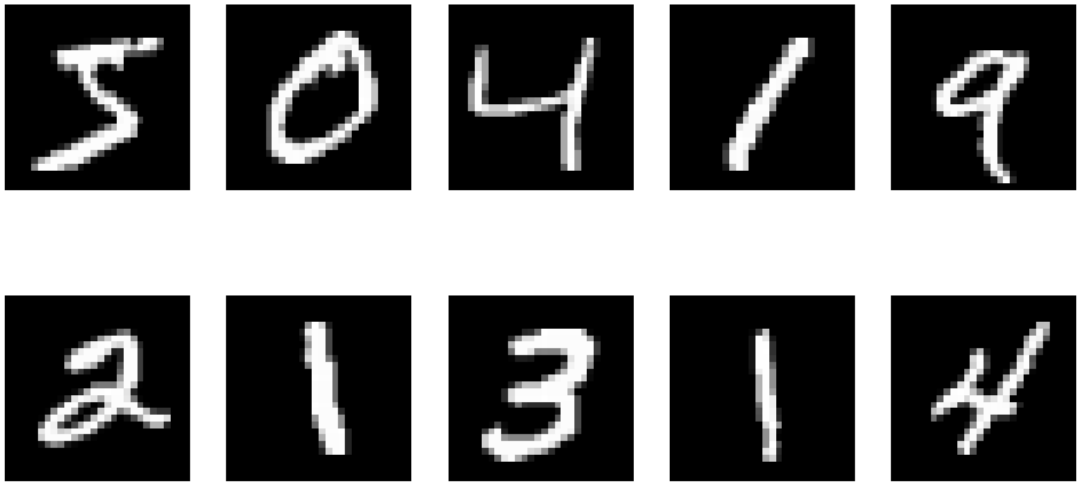
Выводы. МГК

Было показано, что действительно качество сжатия многомерных данных зависит от степени робастности выбранной корреляционной функции. Также были подтверждены выводы из предыдущего пункта о робастности корреляций Пирсона и Спирмена: модели МГК с использованием данных корреляционных функций показали наилучшие результаты

Работа с реальными данными

#1 применение

Одним из наиболее ярких примеров применения метода главных компонент является сжатие изображений. Каждая картинка описывается большим количеством пикселей, хранить которое достаточно ресурснозатратно. Рассмотрим применение метода главных компонент на наборе данных из рукописных цифр



Сравнение методов