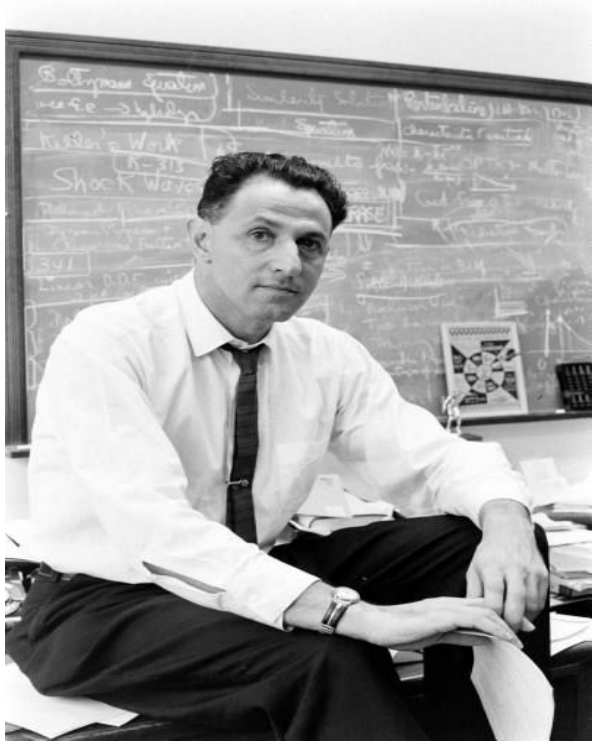
Метод главных компонент

Баранов Н. М.
19.Б13-ПУ

Проклятие размерности



Ричард Эрнест Бе́ллман (26 августа 1920, Нью-Йорк, США — 19 марта 1984, Лос-Анджелес, США) — американский математик, один из ведущих специалистов в области математики и вычислительной техники. Ввел термин «проклятие размерности» в 1961 году.

Пример проклятия размерности

Рассмотрим единичный интервал [0,1]. 100 равномерно разбросанных точек будет достаточно, чтобы покрыть этот интервал с частотой не менее 0,01.

Теперь рассмотрим 10-мерный куб. Для достижения той же степени покрытия потребуется уже 10^{20} точек. То есть, по сравнению с одномерным пространством, требуется в 10^{18} раз больше точек.

Поэтому, например, использование переборных алгоритмов становится неэффективным при возрастании размерности системы.

Сферы возникновения

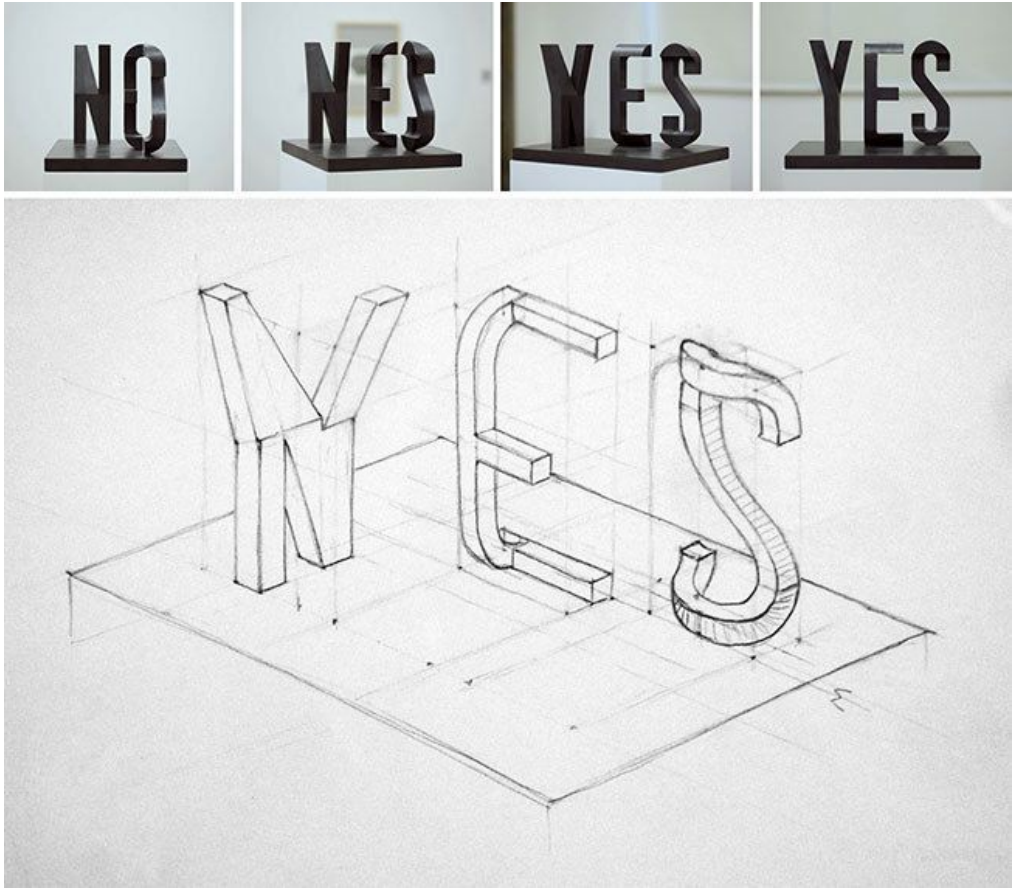
- Машинное обучение
- Задачи распознавания
- Задачи оптимизации
- Комбинаторная геометрия
- Работа со сложными системами

Трудности при работе со сложными системами

- Трудоемкость вычислений
- Необходимость хранения огромного количества данных
- Увеличение доли шумов

Способ решения

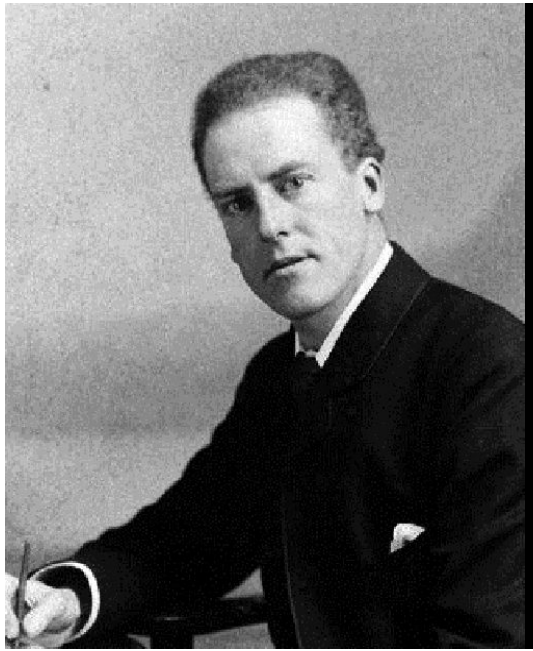
Основная идея при решении проблемы — понизить размерность пространства, а именно спроецировать данные на подпространство меньшей размерности. На этой идее и основан метод главных компонент.



Пример проецирования данных на подпространство меньшей размерности

История появления

Карл Пи́рсон (27 марта 1857, Лондон — 27 апреля 1936, Лондон) — английский математик, статистик, биолог и философ; основатель математической статистики, один из основоположников биометрики. Предложил идею метода главных компонент в 1901. В русскоязычных источниках его иногда называют Чарлз Пирсон.

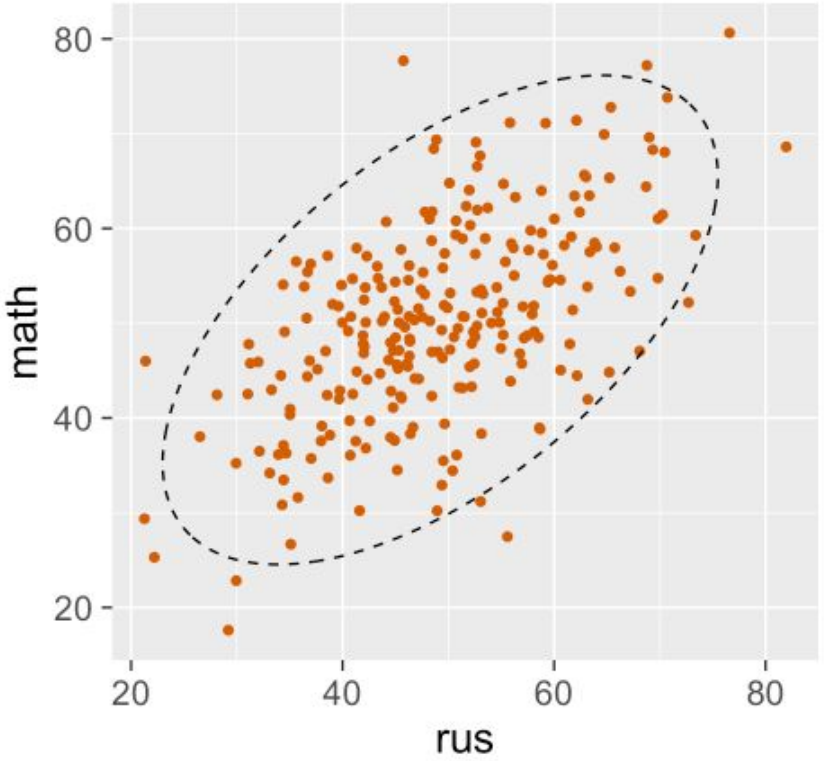


Гарольд Хотеллинг (29 сентября 1895, Фулда, Миннесота — 26 декабря 1973, Чапел-Хилл, Северная Каролина) — американский экономист и статистик. Детально разработал метод главных компонент, предложенный Карлом Пирсоном.

Эквивалентные постановки метода главных компонент

1. Аппроксимировать данные линейными многообразиями меньшей размерности
2. Найти подпространства меньшей размерности, в ортогональной проекции на которые разброс данных максимален
3. Найти подпространства меньшей размерности, в ортогональной проекции на которые среднеквадратичное расстояние между точками максимально
4. Для данной многомерной случайной величины построить такое ортогональное преобразование координат, что в результате корреляции между отдельными координатами обратятся в ноль.

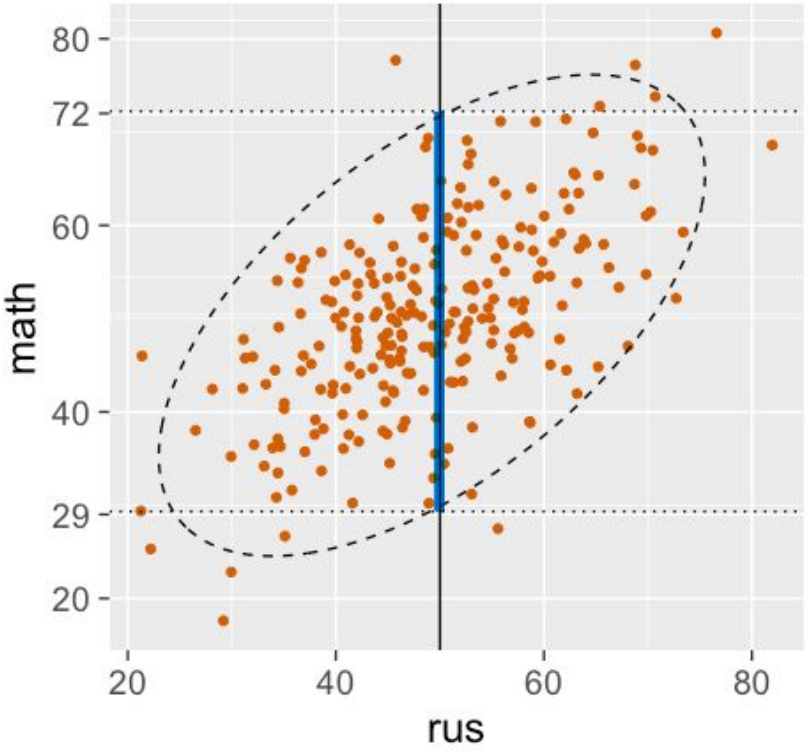
Пример “Школьные оценки”



Пусть у нас имеются результаты теста для школьников по двум предметам — например, по русскому языку и математике. Тогда мы можем построить по этим результатам график.

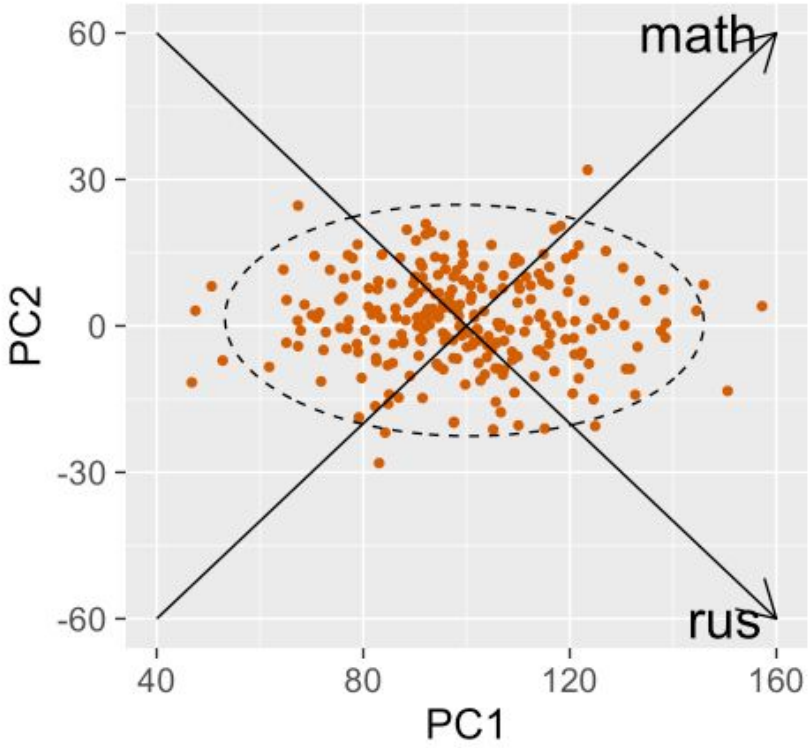
Предположим, что нам надо уменьшить размерность — вместо двух чисел на каждого школьника хранить только одно число.

Пример “Школьные оценки”



Мы можем отбросить одну из переменных и оставить другую. Например, можно записывать в аттестат только оценку по русскому языку, а оценку по математике игнорировать. Но в таком случае мы потеряем слишком много информации.

Пример “Школьные оценки”



Нам необходимо выбрать такую систему координат, в которой мы сможем избавиться от зависимостей между переменными. Именно благодаря этому новая система координат будет «экономнее» старой и мы можем выделить в ней переменную PC1, содержащую большую часть информации.

Основные понятия

- Линейное многообразие

  $M = \{v + x \mid x \in L\}$

- Линейная комбинация
- Ортонормированная система
- Ортогональное преобразование
- Ковариационная матрица

  $Cov(Xi,Xj) = E[(Xi - E(Xi)) * (Xj - E(Xj))]$

Аппроксимация данных линейными многообразиями

Дано: $x_1, x_2, \dots, x_m \in R^n$, $k = 1, 2, \dots, n-1$

Найти: $L_k \subset R^n : \sum_{i=1}^{m} dist^2(x_i, L_k) \to min$

$\forall L_k = \{a_0 + \beta_1 a_1 + \dots + \beta_k a_k, \beta_i \in R\}$, где параметры β_i пробегают вещественную прямую R, $a_0 \in R^n$, $\{a_1, a_2, \dots, a_k\} \subset R^n$ – ортонормированный набор векторов.

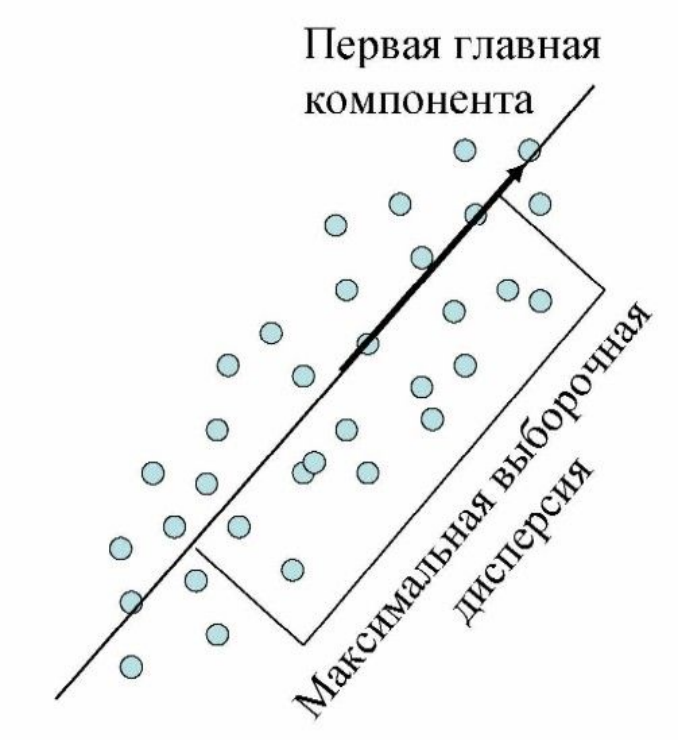
Аппроксимация данных линейными многообразиями

$$\sum_{i=1}^{m} dist^2(x_i,\, L_k) = \left|\left| x_i - a_0 \, - \sum_{j=1}^{k} a_j(a_j x_j - a_0) \right|\right|^2$$

Решение задачи аппроксимации для $k = 1, 2, \dots, n - 1$ дается набором вложенных линейных многообразий $L_0 \subset L_1 \subset \dots L_{n-1}$, $L_k = \{a_0 + \beta_1 a_1 + \dots + \beta_k a_k, \beta_i \in R\}$. Эти линейные многообразия определяются ортонормированным набором векторов $\{a_1, \dots, a_{n-1}\}$ – векторами главных компонент и вектором a_0. Вектор a_0 ищется как решение задачи минимизации для L_0:

$$a_0 = \arg\min \left(\sum_{i=1}^{m} dist^2(x_i,\, L_k) \right)$$

Аппроксимация данных линейными многообразиями



Ищем такой вектор, при котором максимизировалась бы дисперсия проекции нашей выборки на него.

Диагонализация ковариационной матрицы

$$C = [c_{ij}], c_{ij} = \frac{1}{m-1} \sum_{l=1}^{m} \left(x_{li} - \overline{X_l} \right) \left(x_{lj} - \overline{X_j} \right)$$

Векторы главных компонент для задач о наилучшей аппроксимации и о поиске ортогональных проекций с наибольшим рассеянием — это ортонормированный набор $\{a_1, \ldots, a_n\}$ собственных векторов эмпирической ковариационной матрицы C, расположенных в порядке убывания собственных значений λ: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n \geq 0$. Данные векторы служат оценкой для собственных векторов ковариационной матрицы $cov(X_i, X_j)$. В базисе из собственных векторов ковариационной матрицы она, естественно, диагональна, и в этом базисе коэффициент ковариации между различными координатами равен нулю.

Диагонализация ковариационной матрицы

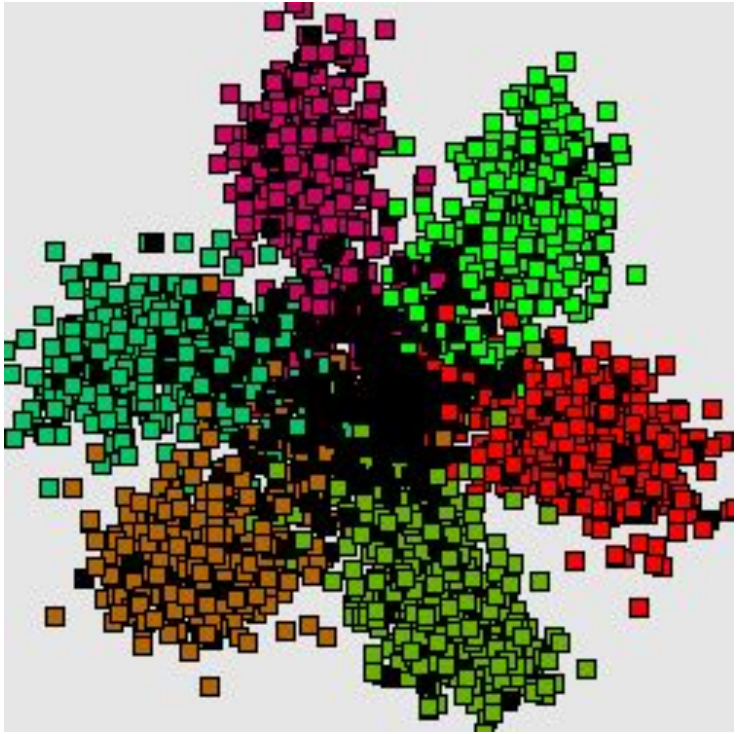
Если спектр ковариационной матрицы вырожден, то выбирают произвольный ортонормированный базис собственных векторов. Он существует всегда, а собственные числа ковариационной матрицы всегда вещественны и неотрицательны

Подавление шума на изображениях

Примеры

- Биоинформатика
- Хемометрика
- Индексация видео
- Общественные науки

Применение для визуализации



Проекция ДНК-блуждания на первые 2 главные компоненты для генома бактерии «Streptomyces coelicolor».

Спасибо за внимание!