Вопросы на ответы

К. Ф. Сафин

Московский физико-технический институт

18 января 2019 г.

Вопросы

- Методы понижения размерности. Метод главных компонент. Неотрицательные матричные разложения.
- Диаграмма Вороного линейных сегментов. Построение скелета многоугольной фигуры на основе диаграммы Вороного сегментов.
- Основная схема построения алгебраических расширений. Требования к семействам отображений.

Снижение размерности

Методы снижения размерности:

- Отбор признаков — перебор всех признаков
  - Add, AddDel
  - Lasso, линейная регрессия
- Синтез признаков — построение нового набора признаков
  - Метод главных компонент
  - t-SNE
  - Автоэнкодер

Метод главных компонент

Исходные признаки: $f_1(x), \dots, f_n(x)$
Новые признаки: $g_1(x), \dots, g_m(x),\ \ m \le n$
Линейное восстановление по новым признакам:

$$\hat{f}_j(x) = \sum_{s=1}^{m} g_s(x) u_{js},\ \ j = 1, \dots, n,\ \ \forall x \in X$$

Точность восстановления:

$$\sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{n} \left(\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i) \right)^2 \to \min_{\{g_s(x_i)\}, \{u_{js}\}}$$

Метод главных компонент

$$F_{l\times n} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_l) & \dots & f_n(x_l) \end{pmatrix};\ G_{l\times m} = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & \dots & g_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ g_1(x_l) & \dots & g_m(x_l) \end{pmatrix}$$

Матрица линейного преобразования:

$$U_{n\times m} = \begin{pmatrix} u_1 1 & \dots & u_1 m \\ \dots & \dots & \dots \\ u_n 1 & \dots & u_n m \end{pmatrix};\ \hat{F} = GU^T \approx F$$

$$\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{n}\left(\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i)\right)^2 = ||GU^T - F||^2 \to \min_{G,U}$$

Теорема метода главных компонент

Если $m \leq \mathrm{rk} F$, то минимум $||GU^T - F||^2$ достигается, когда столбцы U — с.в. матрицы $F^T F$, соответствующие m максимальным с.з. $\lambda_1, ..., \lambda_m$, а матрица $G = FU$.
При этом:

- U — ортонормирована: $U^T U = I_m$,
- G — ортогональна: $G^T G = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_m)$,
- $U\Lambda = F^T F U$; $G\Lambda = F F^T G$,
- $||GU^T - F||^2 = ||F||^2 - \mathrm{tr}\Lambda = \sum\limits_{j=m+1}^{n} \lambda_j$.

Сингулярное разложение

Произвольная $l \times n$-матрица представима в виде сингулярного разложения:

$$F = VDU^T$$

. Свойства:

- $V_{l \times n} = (v_1, ..., v_n)$ ортогональна, $V^T V = I_n$, столбцы v_j — с.в. матрицы FF^T,
- $U_{n \times n} = (u_1, ..., u_n)$ ортогональнаб $U^T U = I_n$, столбцы u_j — с.в. матрицы $F^T F$,
- $D_{n \times n}$ диагональна, $D = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, ..., \sqrt{\lambda_n})$, $\lambda_j \geq 0$ — с.з. матриц $F^T F$ и FF^T.

Связь PCA и сингулярного разложения

При $m = n$:

- $||GU^T - F||^2 = 0$
- Представление $\hat{F} = GU^T = F$ точное и совпадает с сингулярным разложением при $G = V\sqrt{\Lambda}$:

$$F = GU^T = V\sqrt{\Lambda}U^T; \; U^T U = I_m; \; V^T V = I_m$$

- линейное преобразование U работает в обе стороны:

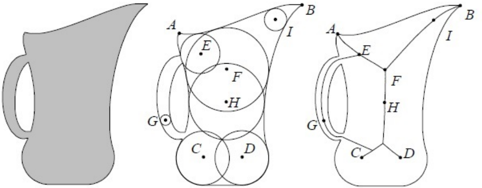
$$F = GU^T; \; G = FU$$

Т.к. новые признаки некореллированы $\left(G^T G = \Lambda\right)$, преобразование U — декоррелирующее.

Скелет фигуры

Пустой круг фигуры A — замкнутое множество точек $\tilde{S}_r(p) = \{q : q \in R^2, d(p,q) \le r\} : \ \tilde{S}_r(p) \subset A$

Скелет фигуры — множество центров всех её максимальных пустых кругов.



Структура скелета многоугольной фигуры

Типы ветвей скелета многоугольной фигуры:

- отрезки биссектрис,
- отрезки серединных перпендикуляров,
- ветви параболы.

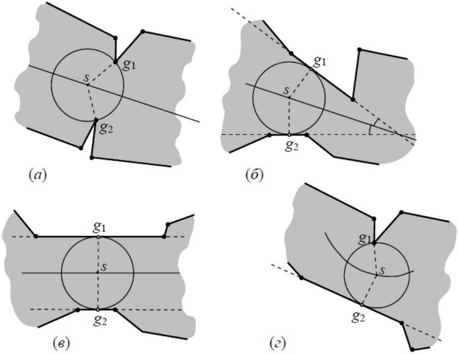
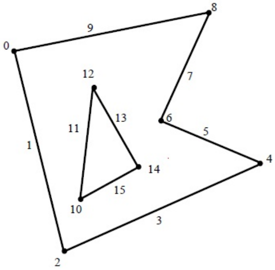
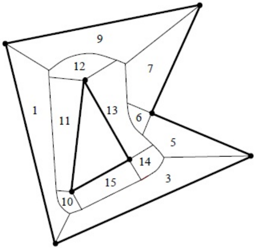


Диаграмма Вороного многоугольной фигуры

Сайт фигуры — вершина или сторона фигуры с инцидентными вершинами.
Ячейка Вороного сайта — г.м.т. фигуры, для которых этот сайт является ближайшим.
Диаграмма Вороного многоугольной фигуры — объединение границ смежных ячеек Вороного (бисекторов).

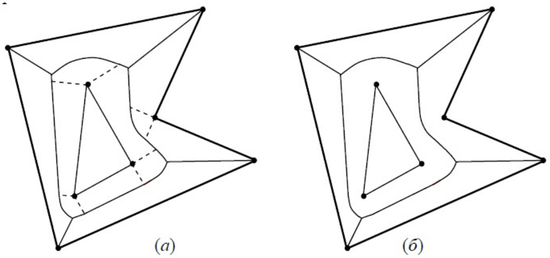




Получение скелета из диаграммы Вороного

Ветви скелета образуют все бисекторы пар сайтов, не являющихся соседними, и только они, т.к.:

- Скелет многоугольной фигуры является подмножеством её диаграммы Вороного.
- Бисектор пары сайтов, не являющихся соседними, содержится в скелете многоугольной фигуры.
- Бисектор пары соседних сайтов не содержится в скелете многоугольной фигуры.



Переборный алгоритм построения диаграммы Вороного

- Построение вершин диаграммы Вороного
  - Перебор всех троек сайтов.
  - Построение касательных окружностей для троек.
- Построение бисекторов диаграммы
  - Определение типа бисектора для смежных ячеек диаграммы.
  - Тип бисектора зависит от пары определяющих сайтов.

Задача синтеза корректного алгоритма

$\mathfrak{I}_i$ — пространство начальных информаций,
$\mathfrak{I}_f$ — пространство конечных информаций.
Отображение, реализуемое алгоритмом:

$$\mathfrak{I}_i \xrightarrow{\text{A}} \mathfrak{I}_f$$

Рассматриваются некорректные задачи: $\exists$ решение, но не !

$$\mathfrak{m}^* = \{A | A : \mathfrak{I}_i \mathfrak{I}_f\}$$

I_{str} — структурная информация (требования к алгоритму), описание подмножества допуст. отображений $\mathfrak{m}(I_{str}) \in \mathfrak{m}*$.
$\forall$ алгоритм, реализующий $\forall$ допуст. отображение — корректный.
Задача разрешима $\Leftrightarrow$ $(I_{str}) \neq \varnothing$

Алгебраический подход

$\mathfrak{m}(\pi)$ — параметрическое семейство отображений.
Проблемы:

- $\mathfrak{m}(\pi) \cap \mathfrak{m}(I_{str}) = \varnothing$;
- $\mathfrak{m}(\pi) \cap \mathfrak{m}(I_{str}) \neq \varnothing$, но найти корректное отображение вычислительно сложно.

Алгебраический подход: корректирующие операции над $\mathfrak{m}^*$, т.е. вместо $A \in \mathfrak{m}^*$, строится $A \in f(\mathfrak{m}^*)$
Требование к f:
f — сводит оптимиз. задачу к известной, но не усложняет $\mathfrak{m}(\pi)$ настолько, чтобы поиск *extr* стал невозможным.