

Robusna analiza glavnih komponenti

Đimoti, Ela

Master's thesis / Diplomski rad

2023

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:807926>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-08-06**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Ela Đimoti

ROBUSNA ANALIZA GLAVNIH
KOMPONENTI

Diplomski rad

Voditelj rada:
doc. dr. sc. Hrvoje Planinić

Zagreb, srpanj, 2023.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana _____ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. _____, predsjednik
2. _____, član
3. _____, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

1. _____
2. _____
3. _____

Sadržaj

Sadržaj	iii
Uvod	2
1 Klasična analiza glavnih komponenti	3
1.1 Populacijska analiza glavnih komponenti	3
1.2 Uzoračka analiza glavnih komponenti	10
2 Robusna analiza glavnih komponenti uz algoritam najmanjih kvadrata s iterativnim ažuriranjem težina	13
2.1 M-procjenitelji	13
2.2 Proces odskočnika i proces robusne procjene	19
2.3 Računanje	23
2.4 Kriterij zaustavljanja	28
3 Primjena	32
3.1 Podaci snimljeni statičnom kamerom	32
3.2 Podaci iz <i>Yale B Extended</i> skupa podataka	34
Bibliografija	37

Uvod

Analiza glavnih komponenti, tehnika koju je Pearson predstavio još 1901. godine, jedna je od najstarijih i trenutno najpopularnijih tehnika multivarijatne analize. Koristi se za redukciju uzorka koji se sastoji od velikog broja međusobno koreliranih varijabli, s ciljem zadržavanja što više informacija prisutnih u polaznom uzorku. Glavna ideja jest transformirati originalne varijable u manji broj novih, nekoreliranih varijabli koje zadržavaju čim veću varijabilnost početnog uzorka (varijancu). Rekonstrukcije podataka korištenjem analize glavnih komponenti su se ispostavile korisne za probleme prepoznavanja lica i objekata, praćenje, detekciju i modeliranje pozadine i mnoge druge ([4], [13]).

U praksi početni uzorak često ima "oštećene" podatke koje u statistici nazivamo odskočnicima (eng. *outliers*). Oni mogu nastati iz raznih razloga poput šuma senzora, greške u preprocesiranju, okluzije i sl. S obzirom da analiza glavnih komponenti počima na metodi najmanjih kvadrata koja je veoma osjetljiva na odskočnike, postaje nemoguće adekvatno rekreirati početne podatke u potprostoru manje dimenzije. S povećanjem veličine i broja podataka kojima baratamo, a i željom za automatizacijom, ručno čišćenje podataka također postaje nemoguće, stoga je nužno kreirati robusne metode koje će davati stabilna rješenja bez obzira na oštećenje podataka.

U prvom poglavlju ovog rada podsjetit ćemo se najbitnijih rezultata iz klasične analize glavnih komponenti i motivirati što bismo htjeli od robusne verzije metode. Dat ćemo dvije naizgled različite definicije glavnih komponenti i pokazati da su ekvivalentne. Izgradit ćemo teoriju na populacijskoj analizi glavnih komponenti, a potom pokazati kako to primijeniti i iskoristiti u praksi kada ne znamo populaciju iz koje podaci dolaze.

U drugom poglavlju bit će iznesena teorijska podloga za pripremu algoritma robusne analize glavnih komponenti predloženog u [4]. Ona polazi od ideje M-procjenitelja ("maximum-likelihood like") i W-procjenitelja ("weight like") kao robusne alternative klasičnoj metodi najmanjih kvadrata. Glavni dio algoritma bit će određivanje "važnosti" pojedinih piksela u slikama uz korištenje algoritma najmanjih kvadrata s iterativnim ažuriranjem težina (IRLS). Kao i sve druge M-procjene, metoda će ovisiti o parametru skaliranja koji će odlučivati kada određeni piksel smatramo odskočnikom, a kada ne, što znači da ga također moramo robusno procijeniti.

Na kraju ćemo prikazati i usporediti rezultate dobivene primjenom klasičnog i robusnog

algoritma na dva skupa podataka - fotografije sakupljene statičnom kamerom i fotografije lica pod raznim osvjetljenjima.

Poglavlje 1

Klasična analiza glavnih komponenti

Glavna ideja iza analize glavnih komponenti jest smanjiti dimenziju početnog skupa podataka koji sadrži veliki broj međusobno povezanih varijabli, a pritom zadržati maksimalnu količinu informacija. Postoje dvije ideje kako pronaći te nove varijable kroz afine kombinacije početnih. Ugrubo opisano, prva je odabrati te kombinacije tako da maksimiziraju količinu informacija (varijancu), dok je druga ideja da te afine kombinacije minimiziraju grešku aproksimiranja originalnih varijabli. Ispostavlja se da su ti načini ekvivalentni, a dobivene afine kombinacije nazivamo glavnim komponentama. Osim toga, u nastavku su dani i neki važniji rezultati vezani za svojstva i interpretaciju glavnih komponenti.

U drugom dijelu ovog poglavlja je ukratko opisana primjena analize glavnih komponenti na uzorku koji dolazi iz nepoznate populacije, tj. kojem ne poznajemo kovarijacijsku matricu. Dan je i način izračunavanja glavnih komponenti preko dekompozicije singularnih vrijednosti koji je češći u praksi, pogotovo kada se radi o velikom skupu podataka, zbog stabilnosti algoritma i uštede vremena i memorije.

1.1 Populacijska analiza glavnih komponenti

Definicija 1.1.1. Neka je $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)^\top$ slučajni vektor u \mathbb{R}^p sa očekivanjem 0 i kovarijacijskom matricom Σ . Prvih d glavnih komponenti od X su slučajne varijable Y_1, Y_2, \dots, Y_d takve da su Y_i međusobno nekorelirane linearne komponente od X koje maksimiziraju varijancu.

Odnosno, za jedinične vektore $a_i \in \mathbb{R}^p$, $Y_i = a_i^\top X$ gdje je

$$\begin{aligned} \text{za } i = 1, \quad a_1 &= \arg \max_{\tilde{a}_1 \in \mathbb{R}^p} \text{Var } \tilde{a}_1^\top X \quad \text{t.d. } \|\tilde{a}_1\| = 1 \\ \text{za } i > 1, \quad a_i &= \arg \max_{\tilde{a}_i \in \mathbb{R}^p} \text{Var } \tilde{a}_i^\top X \quad \text{t.d. } \|\tilde{a}_i\| = 1, \text{Cov}(a_i^\top X, a_k^\top X) = 0 \text{ za } k < i \end{aligned} \quad (1.1)$$

a_1, a_2, \dots, a_d ćemo nazivati d glavnih smjerova od X .

Zašto a_i moraju imati jediničnu normu? Ako se ispusti taj uvjet, množenjem a_i sa nekim skalarom uvijek se može povećati varijancu od pripadnog Y_i . Postoje i druge normalizacije a_i , npr. Jollife [9] spominje i mogućnost normiranja a_i tako da ima duljinu pripadajućeg svojstvenog vektora.

Ako nije drugačije navedeno u nastavku ovog poglavlja pretpostavlja se da je X slučajni vektor u \mathbb{R}^p s kovarijacijskom matricom Σ i očekivanjem 0 . U slučaju da X ima očekivanje $\mu \neq 0$, d glavnih komponenti se mogu definirati kao d nekoreliranih *afinih* komponenti ($Y_i = a_i^\top X + b_i$) takve da je varijanca od Y_i maksimizirana pod uvjetom $a_i^\top a_i = 1$. U tom slučaju se može vidjeti da vrijede slični rezultati, $\lambda_i = \text{Var}(Y_i)$ te $b_i = -a_i^\top \mu$ (Vidal).

Postavlja se pitanje kako, uz dani X , možemo izračunati njegove pripadne glavne komponente - odgovor daje sljedeći teorem.

Teorem 1.1.2. *Pretpostavimo da je $\text{rang}(\Sigma) \geq d$. Prvih d glavnih komponenti slučajnog vektora X , u oznaci Y_i za $i = 1, 2, \dots, d$ su dane sa*

$$Y_i = a_i^\top X$$

gdje su $\{a_i\}_{i=1}^d$ ortonormirani svojstveni vektori od Σ koji pripadaju d najvećih svojstvenih vrijednosti $\{\lambda_i\}_{i=1}^d$. Štoviše, $\lambda_i = \text{Var}(Y_i)$, $\forall i = 1, \dots, d$

Dokaz. Pretpostavimo prvo da Σ nema ponavljajućih svojstvenih vrijednosti. Budući da je Σ simetrična, realna i pozitivno semi-definitna, i njene svojstvene vrijednosti su realne te njeni svojstveni vektori čine bazu u \mathbb{R}^p . Štoviše, svojstveni vektori za različite svojstvene vrijednosti su međusobno ortogonalni.

Primjetimo da za svaki $a \in \mathbb{R}^p$ vrijedi

$$\text{Var}(a^\top X) = \mathbb{E}_X \left[(a^\top X)(a^\top X)^\top \right] = \mathbb{E}_X \left[a^\top X X^\top a \right] = a^\top \Sigma a$$

Stoga, početni optimizacijski problem je ekvivalentan s

$$\max_{a_1 \in \mathbb{R}^p} a_1^\top \Sigma a_1 \quad \text{t.d.} \quad a_1^\top a_1 = 1$$

Rješavamo ga metodom Lagrangeovih multiplikatora. Tražimo ekstrem iduće funkcije:

$$\mathcal{L}(a_1, \lambda_1) = a_1^\top \Sigma a_1 + \lambda_1 (1 - a_1^\top a_1)$$

gdje je λ_1 Lagrangeov multiplikator. Izjednačavanjem parcijalnih derivacija po a_1 i λ_1 s 0 , dobivamo:

$$\Sigma a_1 = \lambda_1 a_1 \quad \text{i} \quad a_1^\top a_1 = 1$$

Iz prve jednadžbe vidimo da je a_1 svojstveni vektor od Σ sa svojstvenom vrijednošću λ_1 . Koji svojstveni vektor odabrati? Korištenjem svojstva svojstvenog vektora te uvrštavanjem u početni optimizacijski izraz dobivamo $a_1^\top \Sigma a_1 = \lambda_1 a_1^\top a_1 = \lambda_1$. Stoga za a_1 odabiremo svojstveni vektor od Σ kojem pripada najveća svojstvena vrijednost $\lambda_1 = \text{Var}(Y_1) > 0$

Tražimo drugu glavnu komponentu. Koristimo činjenicu da $a_1^\top X$ i $a_2^\top X$ trebaju biti nekorelirane što implicira da su međusobno ortogonalne:

$$0 = \mathbb{E}_X \left[(a_1^\top X) (a_2^\top X)^\top \right] = \mathbb{E}_X \left[a_1^\top X X^\top a_2 \right] = a_1^\top \Sigma a_2 = \lambda_1 a_1^\top a_2$$

S obzirom da je $\lambda_1 \neq 0$ slijedi $a_1^\top a_2 = 0$. Možemo postaviti sljedeći optimizacijski problem

$$\max_{a_2 \in \mathbb{R}^p} a_2^\top \Sigma a_2 \quad \text{t.d.} \quad a_2^\top a_2 = 1 \quad \text{i} \quad a_1^\top a_2 = 0$$

Slično kao i za a_1 definiramo Lagrangian

$$\mathcal{L}(a_2, \lambda_2, \gamma) = a_2^\top \Sigma a_2 + \lambda_2 (1 - a_2^\top a_2) + \gamma a_1^\top a_2$$

Nužni uvjeti da bi (a_2, λ_2, γ) bio ekstrem su

$$\Sigma a_2 + \frac{\gamma}{2} a_1 = \lambda_2 a_2, \quad a_2^\top a_2 = 1 \quad \text{i} \quad a_1^\top a_2 = 0$$

Ako pomnožimo prvu jednadžbu sa a_1^\top dobivamo $a_1^\top \Sigma a_2 + \frac{\gamma}{2} a_1^\top a_1 = \lambda_2 a_1^\top a_2 + \frac{\gamma}{2} = \lambda_2 a_1^\top a_2$, iz čega, ako iskoristimo ortogonalnost a_1 i a_2 , slijedi $\gamma = 2(\lambda_2 - \lambda_1) a_1^\top a_2 = 0$. Uvrstimo da je $\gamma = 0$ u prvu jednadžbu

$$\Sigma a_2 = \lambda_2 a_2$$

Budući da su svojstvene vrijednosti Σ različite, sličnim računom kao i ranije dobivamo da je a_2 svojstveni vektor pridružen drugoj najvećoj svojstvenoj vrijednosti $\lambda_2 = \text{Var}(Y_2)$.

Za preostale a_i koristimo indukciju prateći račun koji smo proveli prilikom računanja a_2 . Pretpostavimo da su a_1, a_2, \dots, a_{i-1} svojstveni vektori od Σ jedinične duljine pridruženi $i-1$ najvećih svojstvenih vrijednosti redom. Vrijedi $\Sigma a_j = \lambda_j a_j$ te $a_i^\top \Sigma a_j = \lambda_j a_i^\top a_j = 0$ za sve $j = 1, 2, \dots, i-1$. S obzirom da je $\lambda_j > 0$ slijedi da je $a_i^\top a_j = 0$ za sve $j = 1, 2, \dots, i-1$. Definiramo Lagrangian

$$\mathcal{L}(a_i, \lambda_i, \gamma_1, \dots, \gamma_{i-1}) = a_i^\top \Sigma a_i + \lambda_i (1 - a_i^\top a_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j a_i^\top a_j$$

Nužni uvjeti da bi $(a_i, \lambda_i, \gamma_1, \dots, \gamma_{i-1})$ bio ekstrem su

$$\Sigma a_i + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\gamma_j}{2} a_j = \lambda_i a_i, \quad a_i^\top a_i = 1 \quad \text{i} \quad a_i^\top a_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, i-1$$

Za svaki $j = 1, 2, \dots, i-1$ pomnožimo prvu jednadžbu sa a_j i dobijemo $\gamma_j = 2(\lambda_j - \lambda_i) a_j^\top a_i = 0$ iz čega slijedi $\Sigma a_i = \lambda_i a_i$ te $\lambda_i = \text{Var}(Y_i)$. Da bismo maksimizirali varijancu, za a_i biramo svojstveni vektor kojem pripada sljedeća najveća svojstvena vrijednost (i -ta po redu).

Razmotrimo sada slučaj kada Σ ima ponavljajuće svojstvene vrijednosti.

Ako pratimo gornji dokaz, problem se javlja u odabiru svojstvenog vektora za svojstvenu vrijednost koja nije jedinstvena. Svojstveni vektori pridruženi različitim svojstvenim vrijednostima su i dalje ortogonalni, dok svojstveni vektori pridruženi ponavljajućim svojstvenim vrijednostima kreiraju svojstveni potprostor. Međutim, bilo koja ortonormirana baza tog potprostora daje zadovoljavajuć skup svojstvenih vektora, odnosno glavnih komponenti. Jedina posljedica, u slučaju ponavljajućih svojstvenih vrijednosti, jest da a_i nisu jedinstveno određeni.

□

U nastavku razmatramo geometrijsku interpretaciju glavnih komponenti kao glavnih osi elipsoida koje kreiraju.

Propozicija 1.1.3. *Za X i Σ kao do sada možemo postaviti jednadžbu p -dimenzionalnog elipsoida*

$$X^\top \Sigma^{-1} X = \text{const.} \quad (1.2)$$

Ako je Σ punog ranga p , glavne komponente od X definiraju glavne osi tih elipsoida.

Dokaz. Glavne komponente od X su definirane transformacijom $(Y_1, Y_2, \dots, Y_p) = Y = A^\top X$ gdje je A ortogonalna matrica čiji je k -ti stupac a_k iz (1.1.1). Zbog ortogonalnosti od A , slijedi da je $X = AY$. Uvrštavanjem u (1.2) dobije se

$$(AY)^\top \Sigma^{-1} (AY) = Y^\top A^\top \Sigma^{-1} AY \quad (1.3)$$

Budući da su svojstveni vektori od Σ^{-1} isti kao oni od Σ , a svojstvene vrijednosti od Σ^{-1} su recipročne onima od Σ (pod pretpostavkom da su sve svojstvene vrijednosti strogo pozitivne). Slijedi da je $A \Lambda^{-1} A^\top = \Sigma^{-1}$ za $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p)$, te

$$(1.3) = Y^\top A^\top A \Lambda^{-1} A^\top AY = Y^\top \Lambda^{-1} Y = \text{const.}$$

Zadnja jednakost se može raspisati kao

$$\sum_{k=1}^p \frac{Y_k^2}{\lambda_k} = \text{const.} \quad (1.4)$$

što je upravo jednačba za elipsu sa glavnim osima Y . \square

Jednačba (1.4) također implicira da su duljine glavnih osi proporcionalne sa $\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_p}$, redom.

Ako su zadnjih nekoliko svojstvenih vrijednosti λ_j dovoljno male da je varijacija u pripadajućem smjeru a_j zanemariva, podatke možemo adekvatno aproksimirati u potprostoru koji razapinju preostali svojstveni vektori. Koliko dobro prvih k glavnih komponenti aproksimira slučajan vektor X ? Odgovor nudi idući teorem.

Teorem 1.1.4. *Neka $X = (X_1, X_2, \dots, X_p)$ ima kovarijacijsku matricu Σ sa parovima svojstvenih vrijednosti i pripadnih svojstvenih vektora $(\lambda_1, a_1), (\lambda_2, a_2), \dots, (\lambda_p, a_p)$ gdje su $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$. Neka su $Y_i = a_i^\top X$ za $i = 1, 2, \dots, p$ glavne komponente. Tada vrijedi*

$$\sigma_{11} + \sigma_{22} + \dots + \sigma_{pp} = \sum_{i=1}^p \text{Var}(X_i) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = \sum_{i=1}^p \text{Var}(Y_i)$$

Dokaz. Iz definicije Σ , znamo da je $\sigma_{11} + \sigma_{22} + \dots + \sigma_{pp} = \text{tr}(\Sigma)$. Također znamo da možemo zapisati $\Sigma = A\Lambda A^\top$ gdje je Λ dijagonalna matrica sa svojstvenim vrijednostima na dijagonali, a $A = [a_1^\top a_2^\top \dots a_p^\top]$ ortogonalna matrica. Koristimo svojstvo traga $\text{tr}(CB) = \text{tr}(BC)$ da bismo dobili

$$\text{tr}(\Sigma) = \text{tr}(A\Lambda A^\top) = \text{tr}(\Lambda A A^\top) = \text{tr}(\Lambda) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p \quad (1.5)$$

\square

Tvrđnja vrijedi i za svaki $k < p$, a općenitiji dokaz se može naći u [3].

Prethodni teorem i njegova općenitija verzija kažu da je proporcija ukupne varijance objašnjena s prvih k glavnih komponenti

$$\frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k + \dots + \lambda_p} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \dots + \sigma_{kk}}{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \dots + \sigma_{kk} + \dots + \sigma_{pp}} \quad (1.6)$$

Prvih k glavnih komponenti dobro predviđa Y ako je taj omjer veliki (obično veći od 80%). Tada tih k glavnih komponenti mogu zamijeniti originalnih p varijabli bez velikog gubitka informacija. Nešto detaljnije o kriterijima odabira broja glavnih komponenti poput tzv. "metode lakta" može se pronaći u [8]. Može se pokazati i da prvih d glavnih komponenti ima najbolju prediktivnu sposobnost među svim d -koordinatama u \mathbb{R}^p ([7], [3]).

Drugi način za definiranje glavnih komponenti od X je preko najboljeg linearnog predviđitelja. Podsjetimo se definicije.

Definicija 1.1.5. *Najbolji linearni predviđitelj* od X uz danu slučajnu varijablu Z nad \mathbb{R}^p je slučajni vektor \hat{X} dimenzije q koji je afina funkcija od Z i takav da je

$$\mathbb{E} \left(|X - \hat{X}|^2 \right) = \mathbb{E} \left(|X - \hat{\alpha} - \hat{\beta}^\top Z|^2 \right) = \min_{\alpha \in M_{q,1}, \beta \in M_{p,q}} \mathbb{E} \left(|X - \alpha - \beta^\top Z|^2 \right)$$

Uobičajena oznaka je $\hat{X} = P[X|Z]$

Pogreška predviđanja, $X - P[X|Z]$ zove se *rezidual* i označava se $e(X|Z)$.

Koristeći definiciju najboljeg linearnog predviđitelja, glavne komponente možemo definirati i na sljedeći način

Definicija 1.1.6. Za $d < p$, prvih d glavnih komponenti od X možemo definirati kao slučajne varijable $Y'_i := a_i^\top X$ takve da vrijedi

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(|X - P[X|a_1^\top X]|^2 \right) &= \min_{a \in \mathbb{R}^p} \mathbb{E} \left(|X - P[X|a^\top X]|^2 \right) \\ \mathbb{E} \left(|X - P[X|a_j^\top X]|^2 \right) &= \min_{a \perp_{\Sigma} a_1, \dots, a_{j-1}} \mathbb{E} \left(|X - P[X|a^\top X]|^2 \right), \quad \text{za } j = 2, \dots, d \end{aligned} \quad (1.7)$$

gdje $a \perp_{\Sigma} b$ označava $a^\top \Sigma b = 0$.

Može se pokazati da su te dvije definicije ekvivalentne, odnosno $Y'_i = Y_i$. Pritom se koristi sljedeći teorem, čiji dokaz se može naći u [7] ili [3].

Teorem 1.1.7. *Neka su P i G kvadratne matrice istog reda p takve da je P simetrična, a G simetrična i pozitivno definitna matrica. Tada je ekvivalentno:*

(i) *Vektori a_1, a_2, \dots, a_p su takvi da je*

(1) $a_1 \neq 0$ i

$$\frac{a_1^\top P a_1}{a_1^\top G a_1} = \max_{a \neq 0} \frac{a^\top P a}{a^\top G a}$$

(2) *za $j = 1, 2, \dots, p$*

$$\frac{a_j^\top P a_j}{a_j^\top G a_j} = \max_{a \perp_G a_1, \dots, a_{j-1}} \frac{a^\top P a}{a^\top G a}$$

(ii) *Vektori a_1, a_2, \dots, a_p su takvi da je za svaki $i = 1, 2, \dots, p$, a_i svojstveni vektor od $G^{-1}P$ koji odgovara svojstvenoj vrijednosti λ_i , pri čemu su svojstvene vrijednosti poredane po padajućem poretku ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$) i $a_i^\top G a_j = 0$ za svaki $j \neq i$.*

Propozicija 1.1.8. *Definicija 1.1.1 i definicija 1.1.6 su ekvivalentne.*

Dokaz. Prvo ćemo pokazati da je (1.1) ekvivalentno (uz uvjet da su a_i norme jedan)

(1) $a_1 \neq 0$ i

$$\frac{a_1^\top \Sigma a_1}{a_1^\top a_1} = \max_{a \neq 0} \frac{a^\top \Sigma a}{a^\top a}$$

(2) za $j = 1, 2, \dots, p$

$$\frac{a_j^\top \Sigma a_j}{a_j^\top a_j} = \max_{a \perp \Sigma a_1, \dots, \Sigma a_{j-1}} \frac{a^\top \Sigma a}{a^\top a},$$

a (1.7) ekvivalentno

(3) $a_1 \neq 0$ i

$$\frac{a_1^\top \Sigma^2 a_1}{a_1^\top \Sigma a_1} = \max_{a \neq 0} \frac{a^\top \Sigma^2 a}{a^\top \Sigma a}$$

(4) za $j = 1, 2, \dots, p$

$$\frac{a_j^\top \Sigma^2 a_j}{a_j^\top \Sigma a_j} = \max_{a \perp \Sigma a_1, \dots, \Sigma a_{j-1}} \frac{a^\top \Sigma^2 a}{a^\top \Sigma a},$$

Potom se, primjenom prethodnog teorema (1.1.7), dobiva tražena konzistentnost definicija.

Prva ekvivalencija jednostavno slijedi korištenjem $\text{Var}(a^\top X) = a^\top \text{Var}(X) a = a^\top \Sigma a$. U dokazu (1.1.2) smo već vidjeli da iz nekoreliranosti glavnih komponenti slijedi $a_i^\top \Sigma a_j = 0$ za $i \neq j$.

Za drugu koristimo svojstva traga i matematičkog očekivanja

$$\begin{aligned}
\mathbb{E} \left(\left| X - P[X|X^\top a] \right|^2 \right) &= \text{tr} \left(\mathbb{E} \left(\left(X - P[X|X^\top a] \right)^\top \left(X - P[X|X^\top a] \right) \right) \right) \\
&= \mathbb{E} \left(\text{tr} \left(\left(X - P[X|X^\top a] \right)^\top \left(X - P[X|X^\top a] \right) \right) \right) \\
&= \mathbb{E} \left(\text{tr} \left(\left(X - P[X|X^\top a] \right) \left(X - P[X|X^\top a] \right)^\top \right) \right) \\
&= \text{tr} \left(\mathbb{E} \left(\left(X - P[X|X^\top a] \right) \left(X - P[X|X^\top a] \right)^\top \right) \right) \\
&= \text{tr} \left(\text{cov} \left(X - P[X|X^\top a] \right) \right) \\
&= \text{tr} \left(\Sigma_{XX} - \Sigma_{Y,a^\top Y} \Sigma_{a^\top Y, a^\top Y}^{-1} \Sigma_{a^\top Y, Y} \right) \\
&= \text{tr} \left(\Sigma - \Sigma a \left(a^\top \Sigma a \right)^{-1} a^\top \Sigma \right) \\
&= \text{tr}(\Sigma) - \left(a^\top \Sigma a \right)^{-1} \text{tr}(\Sigma a a^\top \Sigma) \\
&= \text{tr}(\Sigma) - \left(a^\top \Sigma a \right)^{-1} \text{tr}(a^\top \Sigma^2 a) = \text{tr}(\Sigma) - \frac{a^\top \Sigma^2 a}{a^\top \Sigma a}
\end{aligned}$$

Slijedi da je minimizacija $a \mapsto \mathbb{E} \left(\left| X - P[X|X^\top a] \right|^2 \right)$ ekvivalentna maksimizaciji $a \mapsto \frac{a^\top \Sigma^2 a}{a^\top \Sigma a}$ za jedinični vektor $a \neq 0$. □

Dakle, iste vrijednosti a_1, a_2, \dots, a_d maksimiziraju varijancu i minimiziraju pogrešku predviđanja.

1.2 Uzoračka analiza glavnih komponenti

U praksi obično kovarijacijska matrica Σ nije poznata, već se raspolaže sa uzorkom iz nepoznate populacije.

Neka je x_1, x_2, \dots, x_n realizacija niza n n.j.d. slučajnih vektora dimenzije p iz populacije sa nepoznatim očekivanjem μ i nepoznatom kovarijacijskom matricom Σ te neka tih n opservacija daju sljedeću matricu podataka

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{p1} & x_{p2} & \dots & x_{pn} \end{bmatrix} = [x_1 x_2 \dots x_n]$$

Tada obično promatramo uzoračku kovarijacijsku matricu S definiranu kao

$$S = \frac{1}{n-1} (\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})(\mathbf{X} - \bar{\mathbf{X}})^\top$$

gdje je $\bar{\mathbf{X}}$ matrica koja u i -tom retku na svakom mjestu ima istu vrijednost - aritmetičku sredinu preostalih elemenata u i -tom retku, i tako za svaki $i = 1, 2, \dots, p$.

Uzoračke glavne komponente definiramo analogno. Prvih k glavnih komponenti od \mathbf{X} su stupci matrice $\mathbf{A} = [a_1 \dots a_k] \in R^{p \times k}$ takvi da vrijedi:

$$\sum_{i=1}^n \|\mathbf{A}^\top x_i\|_2^2 = \max_{\tilde{\mathbf{A}}} \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{A}}^\top x_i\|_2^2 \quad \text{uz uvjet } \tilde{\mathbf{A}}^\top \tilde{\mathbf{A}} = I \quad (1.8)$$

Podaci x_i se mogu aproksimirati kao linearna kombinacija glavnih komponenti uz $\tilde{x}_i = \mathbf{A}\mathbf{A}^\top x_i = \mathbf{A}y_i$. Pritom su $y_i \in R^k$, $y_i := \mathbf{A}^\top x_i$ linearni koeficijenti dobiveni projiciranjem početnih podataka na potprostor koji razapinju glavne komponente.

Druga formulacija problema pronalaska glavnih komponenti koja se često koristi kaže da su prvih k glavnih komponenti stupci matrice \mathbf{A} kao gore za koje vrijedi:

$$\sum_{i=1}^n \|x_i - \mathbf{A}\mathbf{A}^\top x_i\|_2^2 = \min_{\tilde{\mathbf{A}}} \sum_{i=1}^n \|x_i - \tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{A}}^\top x_i\|_2^2 \quad \text{uz uvjet } \tilde{\mathbf{A}}^\top \tilde{\mathbf{A}} = I \quad (1.9)$$

Možemo linearne koeficijente y_i učiniti eksplicitinim varijablama i uz uvjet $\tilde{\mathbf{A}}^\top \tilde{\mathbf{A}} = I$ minimizirati

$$\sum_{i=1}^n \|x_i - \mathbf{A}y_i\|_2^2 \quad (1.10)$$

po \mathbf{A} i $\mathbf{Y} := [y_1 y_2 \dots y_n]$.

Iako su gornji zadaci minimizacije ekvivalentni, obično se rješavaju na različite načine. Može se pokazati da za ovako definirane glavne komponente vrijede slični rezultati kao u prvom djelu ([1], [8], [9]).

Najsmislenije je promatrati glavne komponente za slučajni vektor kojemu su komponente mjerene u istim jedinicama i imaju varijance jednakih razmjera. Zašto? Ako individualno skaliramo varijable u X , tj. ako umjesto X promatramo ΦX , gdje je $\Phi = \text{diag}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n)$, onda $\Phi \Sigma \Phi$ nema istu strukturu svojstvenih vektora i vrijednosti kao Σ . Isto tako, ako neka varijabla X_i ima puno veću varijancu od preostalih varijabli, onda će prva glavna komponenta biti gotovo jednaka X_i . Iz tog razloga, nerijetko se umjesto uzoračke kovarijacijske matrice koristi uzoračka korelacijska matrica

$$R = D^{-\frac{1}{2}} S D^{-\frac{1}{2}}$$

gdje je $\mathbf{D} = \text{diag}(s_{11}, \dots, s_{mm})$.

S obzirom da u primjeni često raspolažemo sa iznimno velikim skupovima podataka, a računanje uzoračke kovarijacijske/korelacijske matrice i svojstvenih vrijednosti može biti vremenski i memorijski zahtjevno, uobičajeno je, umjesto dekompozicije svojstvenih vrijednosti, napraviti dekompoziciju singularnih vrijednosti matrice \mathbf{X} . Prije nego što pokažemo kako se prvih d svojstvenih vrijednosti od \mathbf{S} može dobiti iz prvih d singularnih vrijednosti od \mathbf{X} , ponovimo iskaz teorema o dekompoziciji singularnih vrijednosti.

Teorem 1.2.1 (SVD). *Neka je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ranga r . Tada postoje ortogonalne matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ i $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ takve da je na jedinstven način određena dijagonalna matrica*

$$\mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V} = \mathbf{\Gamma} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}_+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

gdje je $\mathbf{\Gamma}_+ = \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_r)$ uz $\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \dots \geq \gamma_r > 0$.

Kažemo da je $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Gamma} \mathbf{V}^T$ dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD) matrice \mathbf{A} .

Propozicija 1.2.2. *Singularne vrijednosti matrice opservacija \mathbf{X} jednake su svojstvenim vrijednostima od $\mathbf{X} \mathbf{X}^T$.*

Dokaz. Radi jednostavnosti zapisa, pretpostavit ćemo da je \mathbf{X} centriran, odnosno da je sredina 0. Ako nije, oduzmemo $\bar{\mathbf{X}}$, matricu dimenzija kao početna matrica \mathbf{X} koja na mjestu (i, j) ima srednju vrijednost za redak i te promatramo rezultat kao novi \mathbf{X} . Tada je uzoračka kovarijacijska matrica jednaka $\mathbf{S} = \frac{1}{n-1} \mathbf{X} \mathbf{X}^T$.

Ako provedemo dekompoziciju singularne vrijednosti (SVD) nad \mathbf{X} dobivamo

$$\mathbf{X} = \mathbf{U} \mathbf{\Gamma} \mathbf{V}^T.$$

Uvrstimo to u definiciju od \mathbf{S} i slijedi

$$\mathbf{S} = \frac{1}{n-1} (\mathbf{U} \mathbf{\Gamma} \mathbf{V}^T) (\mathbf{U} \mathbf{\Gamma} \mathbf{V}^T)^T = \frac{1}{n-1} \mathbf{U} \mathbf{\Gamma} \mathbf{V}^T \mathbf{V} \mathbf{\Gamma} \mathbf{U}^T = \mathbf{U} \frac{\mathbf{\Gamma}^2}{n-1} \mathbf{U}^T$$

Budući da je \mathbf{U} ortogonalna, a $\frac{\mathbf{\Gamma}^2}{n-1}$ dijagonalna, u posljednjem koraku smo dobili dekompoziciju svojstvenih vrijednosti od \mathbf{S} . Lijevi singularni vektori iz \mathbf{U} su svojstveni vektori, a svojstvene vrijednosti su $\lambda_i = \frac{\gamma_i^2}{n-1}$.

□

Poglavlje 2

Robusna analiza glavnih komponenti uz algoritam najmanjih kvadrata s iterativnim ažuriranjem težina (IRLS)

U praksi, podaci s kojima radimo nerijetko imaju znatnu količinu odskočnika (eng. *outliers*) koji mogu bitno narušiti rezultat klasične analize glavnih komponenti. Robusna analiza glavnih komponenti koristi robusnije mjere kako bi ublažila utjecaj odskočnika.

Da bi glavna ideja ovog poglavlja bila što jasnija u idućim potpoglavljima ćemo definirati M- i W-procjenitelje, proces odskočnika i proces robusne procjene, potom ćemo iznijeti algoritam robusne analize glavnih komponenti uz algoritam najmanjih kvadrata s iterativnim ažuriranjem sredina koji polazi iz rada [4], te prikazati neke rezultate dobivene korištenjem tog algoritma.

2.1 M-procjenitelji

Motivirat ćemo M-procjenitelje na jednostavnijem problemu regresije. Neka je $X \in M_{p,n}$ matrica čiji su stupci n -dimenzionalni slučajni vektori (oznaka X_k), $Z = (Z_1, Z_2, \dots, Z_n)$ n -dimenzionalni slučajni vektor te neka je $\beta = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)$ p -dimenzionalni vektor nepoznatih parametara takav da $Z = X^T \beta + \varepsilon$. Ovdje je $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ n -dimenzionalni slučajni vektor pogrešaka. Zasada pretpostavljamo da je $\sqrt{\text{var}(\varepsilon_i)} = 1 =: \sigma$, odnosno da je σ poznata i fiksirana.

Definicija 2.1.1. Neka su X, Z, β i ε kao gore. Uz danu funkciju $\rho : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ koja je simetrična i pozitivno definitna, te uzorak $(z_1, x_1), \dots, (z_n, x_n)$, *M-procjenitelj* za β je vrijednost $\hat{\beta}_M$ takva da vrijedi

$$\sum_{i=1}^n \rho(z_i - x_i \hat{\beta}_M) = \min_{\beta} \sum_{i=1}^n \rho(z_i - x_i \beta) \quad (2.1)$$

Funkciju $\rho(t)$ zovemo *funkcija gubitka*.

Ako je $\rho(t)$ diferencijabilna konveksna funkcija, β_M se može direktno izračunati iz sustava p jednažbi

$$\sum_{i=1}^n \psi(z_i - x_i \beta) x_i^T = 0 \quad (2.2)$$

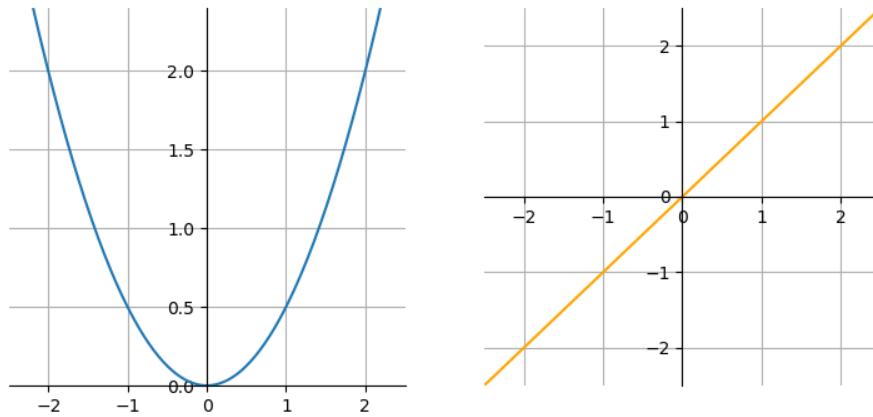
pri čemu je $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ funkcija definirana sa $\psi(t) = \rho'(t)$.

Primjetimo da je u klasičnom problemu najmanjih kvadrata, kojim su M-procjenitelji motivirani, $\rho(t) = \frac{1}{2}t^2$, a $\psi(t) = t$. S obzirom da na klasične najmanje kvadrati odskočnici imaju veliki utjecaj, od funkcije gubitka obično zahtjevamo da ima rast sporiji od kvadratnog.

Promotrimo primjer nekih učestalih ρ - i ψ -funkcija, a potom ćemo na primjeru podataka sa odskočnicima prikazati koliku razliku u rezultatima možemo dobiti.

Obični najmanji kvadrati (eng. *ordinary least squares* - OLS)

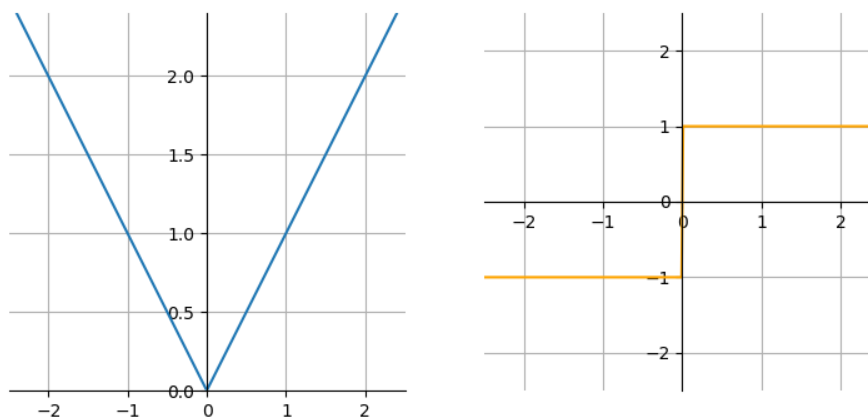
$$\rho(t) = \frac{1}{2}t^2 \quad \psi(t) = t \quad (2.3)$$



Slika 2.1: OLS ρ - i ψ -funkcije

Najmanji apsolutni reziduali (eng. *least absolute residuals - LAR*)

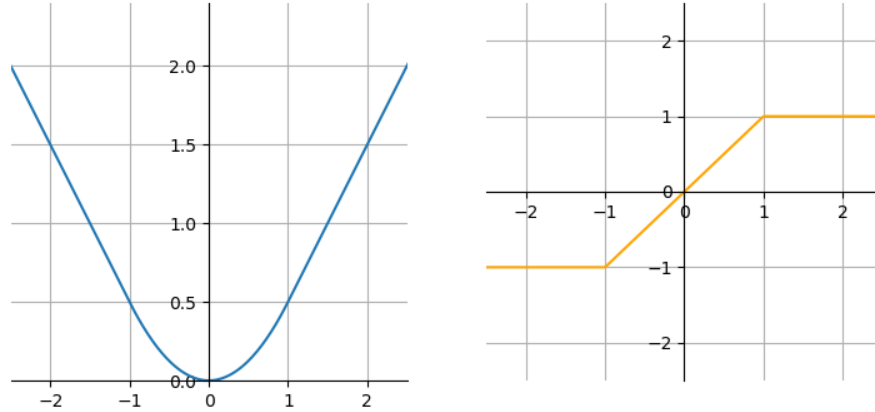
$$\rho(t) = |t| \quad \psi(t) = \text{sgn}(t) \quad (2.4)$$



Slika 2.2: LAR ρ - i ψ -funkcija

Huberov procjenitelj - nastaje kao kombinacija OLS i LAR funkcija. Huberova ψ -funkcija oko 0 ima linearnost OLS ψ -funkcije, a na većim udaljenostima od 0 ima ograničenost LAR ψ -funkcije.

$$\rho(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}t^2, & |t| \leq k \\ k|t| - \frac{1}{2}k^2, & |t| > k \end{cases} \quad \psi(t) = \begin{cases} t, & |t| \leq k \\ k \text{sgn}(t), & |t| > k \end{cases} \quad (2.5)$$

Slika 2.3: Huberova ρ - i ψ -funkcija za $k = 1$

Za primjer kolika može biti razlika u procjeni koristit ćemo skup podataka *Belgijski telefonski pozivi 1950-1973* dostupnih kao dio MASS paketa u R-u. Podaci se sastoje od dva stupca. Prvi stupac bilježi dvoznamenkasti završetak godine u kojoj su pozivi ostvareni, a drugi broj poziva te godine u milijunima. Ispostavilo se da postoji pogreška u podacima - za period od 1964 do 1969 zabilježena je ukupna duljina poziva umjesto količine. Na grafu 2.4 su prikazani podaci, regresijska funkcija dobivena metodom najmanjih kvadrata te regresijska funkcija dobivena korištenjem Huberovog procjenitelja. Vidimo da su odskočnici znatno utjecali na klasičnu regresijsku funkciju - gotovo niti jedan podatak ne procjenjuje dobro.

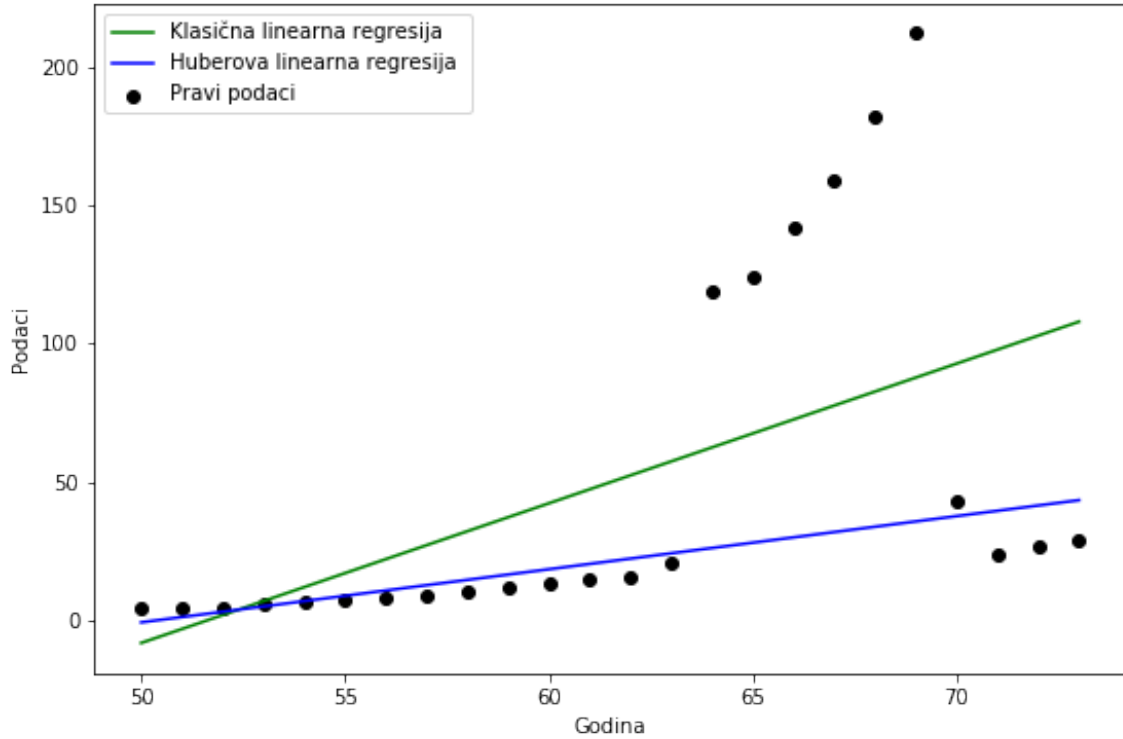
Definicija 2.1.2. Uz oznake kao gore i *funkciju težine* $w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definiranu sa $w(t) = \frac{\psi(t)}{t}$, *W-procjenitelj* za β je β_W takav da vrijedi

$$\sum_{i=1}^n (z_i - x_i \beta_W) w_i x_i^T = 0 \quad (2.6)$$

W u nazivu dolazi od ideje "težine" (eng. *weight*).

U teoriji, M-procjenitelj i W-procjenitelj su jednaki jer su jednačbe (2.15) i (2.6) dvije različite forme istog skupa jednačbi. U praksi ih razlikujemo jer se obično računaju drugačijim metodama.

Preslagivanjem jednačbe (2.6) dobivamo

Slika 2.4: Klasična i Huberova regresija na podacima *Belgium phone calls 1950-1973*

$$\sum_{i=1}^n x_i^T w_i x_i \beta = \sum_{i=1}^n x_i^T w_i z_i \quad (2.7)$$

U matričnom smislu, ako definiramo $W = \text{diag}(w_1, w_2, \dots, w_n)$, gornja jednađba poprima oblik normalne jednađbe linearne regresije s težinama.

$$X^T W X \beta = X^T W Z \quad (2.8)$$

Međutim, sada težine w_i nisu unaprijed određene sa X , već ovise o rezidualima $z_i - x_i \beta$ i funkciji ρ .

Sve do sada smo radili pod pretpostavkom da je σ poznat i fiksiran. U ovom radu, a i često u praksi, σ mora biti procijenjen kako bismo mogli prepoznati odskočnik. Dva su glavna načina procjene σ . Prvi je simultana procjena koeficijenata β i parametra skaliranja σ . Taj način ovdje neće biti korišten, a više o njemu se može pročitati u [6]. Drugi način

je procjena σ unaprijed. Procjenu unaprijed obično radimo tako da jednom ili prije svakog iterativnog koraka izračunamo procjenitelj $\hat{\sigma}$. Nakon toga u iteraciji $\hat{\sigma}$ smatramo poznatom i fiksnom konstantom i nastavljamo s procjenom za β .

Najčešće korišten procjenitelj skale, koji se pokazao i kao veoma otporan na perturbacije ([6], [4]) je **apsolutna devijacija medijana** (eng. *median absolute deviation*), za koji u nastavku koristimo skraćenicu MAD. Računa se na sljedeći način:

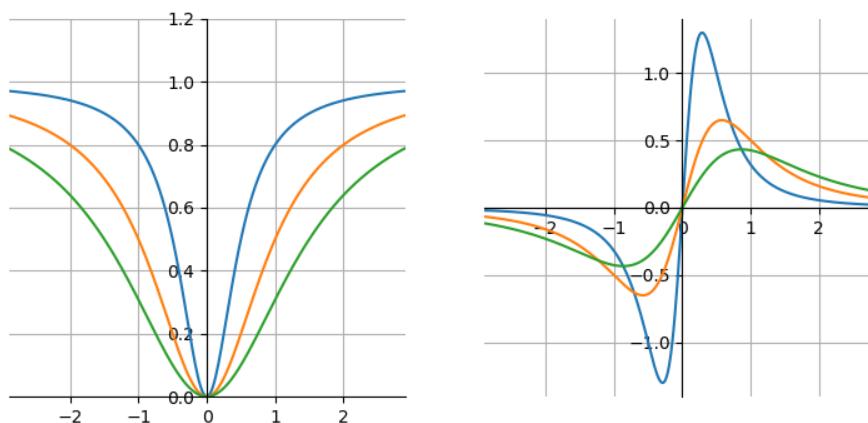
$$\hat{\sigma} = \frac{1}{0.6745} \operatorname{med}_i \left\{ \left| z_i - \beta_i^{(0)} x_i - \operatorname{med}_j \{ z_j - \beta_j^{(0)} x_j \} \right| \right\} \quad (2.9)$$

gdje med označava medijan, $\beta_i^{(0)}$ je prethodna procjena od β_i , a 0.6745 je prosječna vrijednost MAD-a za uzorke iz standardne normalne razdiobe.

Prije nego nastavimo promotrimo definiciju i graf još jedne funkcije. Geman-McClure ρ - i ψ -funkcija ćemo koristiti u računanju robusnih glavnih komponenti. Ove funkcije ovise i o vrijednosti σ - ovisno o σ funkcije mijenjaju oblik, a time i kriterij za odskočnike.

$$\rho(t, \sigma) = \frac{t^2}{t^2 + \sigma^2} \quad (2.10)$$

$$\psi(t, \sigma) = \frac{d\rho(t, \sigma)}{dt} = \frac{2t\sigma^2}{(t^2 + \sigma^2)^2} \quad (2.11)$$



Slika 2.5: Geman-McClure ρ - i ψ -funkcija za $\sigma \in \{0.5, 1, 1.5\}$

Kako bismo mogli koristiti M-procjenitelje u problemu analize glavnih komponenti? Koristeći oznake iz prethodnog potpoglavlja, htjeli smo minimizirati grešku aproksimacije

x_i sa Ay_i i robusnom procjenom sredine $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_p)$ (1.10). Za razliku od klasične analize glavnih komponenti, u kojima μ možemo izračunati kao aritmetičku sredinu uzorka, oduzeti od X i poslije zanemariti, u robusnoj analizi glavnih komponenti i sredinu moramo robusno procijeniti. Možemo zapisati

$$\begin{aligned} x_1 &= \mu + Ay_1 + e_1 \\ x_2 &= \mu + Ay_2 + e_2 \\ &\vdots \\ x_n &= \mu + Ay_n + e_n \end{aligned} \quad (2.12)$$

gdje su e_1, \dots, e_n p -dimenzionalni slučajni vektori pogreške. U nastavku ćemo fiksirati neki $k \in \{1, 2, \dots, p\}$ i promatrati

$$\begin{aligned} x_{k1} &= \mu_k + a^k y_1 + \varepsilon_1 \\ x_{k2} &= \mu_k + a^k y_2 + \varepsilon_2 \\ &\vdots \\ x_{kn} &= \mu_k + a^k y_n + \varepsilon_n \end{aligned} \quad (2.13)$$

gdje je $\varepsilon_k = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ n -dimenzionalni slučajni vektor pogrešaka, a a^k je k -ti redak u matrici A . Skup jednažbi (2.12) možemo sažeto zapisati kao $\mathbf{X} = \mu \mathbf{1}_n^T + \mathbf{A}Y + \mathbf{E}$, pri čemu je \mathbf{E} matrica čije stupce čine e_k . Sada analogan zapis za x^k (k -ti redak u matrici X) kojeg ćemo koristiti kasnije glasi

$$x^k = \mu_k \mathbf{1}_n + Y^T a^k + e^k \quad (2.14)$$

gdje je e^k k -ti redak u matrici E .

Za razliku od M-procjenitelja na jednostavnijem regresijskom problemu, ovdje ne minimiziramo samo po A , već i po Y i μ . Stoga M-procjenitelji A^M , Y^M i μ^M za A , Y i μ redom, moraju biti takvi da vrijedi:

$$\sum_{i=1}^n \rho(x_{ki} - \mu_k^M - (a^k)^M y_i^M, \sigma_k) = \min_{A, Y, \mu} \sum_{i=1}^n \rho(x_{ki} - \mu_k - a^k y_i, \sigma_k) \quad (2.15)$$

2.2 Proces odskočnika i proces robusne procjene

U ovom potpoglavlju ćemo predložiti dva načina kako jednažbu (1.10) učiniti robusnijom. Jedan način dolazi direktno iz ideje M-procjenitelja, a to je zamijeniti kvadratnu funkciju nekom robusnijom funkcijom $\rho : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. U ovom slučaju ρ prima dva parametra jer će

osim o samim podacima ovisiti i o procjenjenom σ . Tada dobivamo tzv. *problem robusne procjene*.

$$\min_{A,Y,\mu} \sum_{i=1}^n E_{prp}(x_i - \mu - Ay_i, \sigma) = \min_{A,Y,\mu} \sum_{l=1}^n \sum_{k=1}^p \rho(x_{ki} - \mu_k - a^k y_i, \sigma_k) \quad (2.16)$$

Drugi, intuitivniji način bio bi da uvedemo skup novih varijabli $L = \{L_{ki} : 0 \leq L_{ki} \leq 1, k = 1, 2, \dots, p, i = 1, 2, \dots, n\}$. Tada bismo problem pronalaska glavnih komponenti mogli zapisati u obliku *procesa odskočnika*, tj.

$$\min_{A,Y,\mu} \sum_{i=1}^n E_{po}(x_i - \mu - Ay_i, \sigma) = \min_{A,Y,\mu} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p \left[L_{ki} \frac{(x_{ki} - \mu_k - a^k y_i)^2}{\sigma_k^2} + \Psi(L_{ki}) \right] \quad (2.17)$$

gdje je $\Psi : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ penalizirajuća funkcija za L .

Ako L_{ki} poprima vrijednosti blizu 0, u i -tom uzorku, na mjestu k -tog piksela se nalazi odskočnik i nećemo (značajno) podešavati podatke tom pikselu. Pošto bismo trivijalno mogli minimizirati gornju funkciju ako odaberemo da su svi $L_{ki} = 0$, moramo uvesti i penalizirajuću funkciju Ψ koja će poprimiti suprotne vrijednosti u odnosu na L_{ki} . Dakle, ako je L_{ki} blizu 0, $\Psi(L_{ki})$ će biti blizu 1 i obratno.

S obzirom da je proces odskočnika numerički skup problem, gdje se ne moraju odrediti samo traženi A, Y i μ , već i pomoćni parametri L , želimo pokazati da vrijedi tvrdnja sljedećeg teorema:

Teorem 2.2.1. *Svaki proces odskočnika je ujedno i problem robusne procjene.*

Dokaz. Uvest ćemo oznaku $\tilde{e}_{ki} := x_{ki} - \mu - a^k y_i$, a \tilde{E} neka je matrica $p \times n$ koja na mjestu (k, i) ima \tilde{e}_{ki} . Gornji proces odskočnika sada možemo zapisati kao

$$\min_{\tilde{E}} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p \left[L_{ki} \frac{\tilde{e}_{ki}^2}{\sigma_k^2} + \Psi(L_{ki}) \right] \quad (2.18)$$

Uvodimo funkciju

$$\rho(x, y) = \inf_{0 \leq z \leq 1} \left(z \frac{x^2}{y^2} + \Psi(z) \right) \quad (2.19)$$

Sada možemo preraditi gornju jednadžbu kao

$$(2.18) = \min_{\tilde{E}} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p \rho(\tilde{e}_{ki}, \sigma_k) \quad (2.20)$$

što je upravo formulacija problema robusne procjene.

□

Može se pokazati da vrijedi i obrat uz nekoliko dodanih uvjeta. Radi jednostavnosti teorem će biti dokazan uz pretpostavku da je $\sigma = 1$.

Teorem 2.2.2. *Za neki problem robusne procjene definirajmo $\phi : \langle 0, +\infty \rangle \rightarrow \mathbb{R}$ sa $\phi(t) = \rho(\sqrt{t})$. Ako vrijedi*

- $\lim_{t \rightarrow 0} \phi'(t) = 1$,
- $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi'(t) = 0$ i
- $\phi''(t) < 0$

taj problem robusne procjene možemo zapisati kao problem odskočnika.

Dokaz. Dovoljno je pokazati da je, za prikladnu funkciju $\Psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, minimum funkcije

$$E(x, z) = x^2 z + \Psi(z) \quad (2.21)$$

ujedno i minimum funkcije ρ .

Izjednačavanjem derivacija s obzirom na x i izjednačavanjem dobivamo

$$\rho'(x) = \frac{d\rho(x)}{dx} = 0 = \frac{dE(x, z)}{dx} = 2xz \quad (2.22)$$

Također želimo da vrijedi $\rho(x) = \min_z (x^2 z + \Psi(z))$. Deriviranjem (2.21) po z i izjednačavanjem s 0 dobivamo

$$x^2 + \Psi'(z) = 0 \quad (2.23)$$

Uvrstimo $z = \frac{\rho'(x)}{2x}$ iz (2.22) u prethodnu jednadžbu. Slijedi

$$\Psi' \left(\frac{\rho'(x)}{2x} \right) = -x^2 \quad (2.24)$$

Da bismo pojednostavili ostatak računa koristimo funkciju ϕ . Vrijedi:

$$\phi(x^2) = \rho(x) \quad (2.25)$$

Derivacijom dobivamo

$$\phi'(x^2) = \frac{\rho'(x)}{2x} = z \quad (2.26)$$

Uvrstimo u (2.24):

$$\Psi'(\phi'(x^2)) = -x^2 \quad (2.27)$$

tj.

$$\Psi'(\phi'(x)) = -x \quad (2.28)$$

Ψ možemo dobiti integriranjem gornje jednadžbe s obzirom na x . Ideja je zapisati lijevi integral u obliku $\int f(g(x))g'(x)dx$, stoga ćemo pomnožiti obje strane sa $\phi''(x)$:

$$\int \Psi'(\phi'(x))\phi''(x)dx = \int -x\phi''(x)dx \quad (2.29)$$

$$\Psi(\phi'(x)) = -x\phi'(x) + \int \phi'(x)dx \quad (2.30)$$

$$\Psi(\phi'(x)) = -x\phi'(x) + \phi(x) \quad (2.31)$$

Želimo izraziti $\Psi(z)$. Pod pretpostavkom da postoji inverz od ϕ uvrštavanjem $z = \phi'(x^2)$ iz (2.26) u gornju jednadžbu dobivamo

$$\Psi(z) = -z(\phi')^{-1}(z) + \phi((\phi')^{-1}(z)) \quad (2.32)$$

Zašto su nam u računu bili potrebni gornji uvjeti? Da bi se radilo o procesu odskočnika, z mora poprimati vrijednosti između 0 i 1. Ovdje je z izražen preko ϕ pa zato u tvrdnji teorema tražimo

$$\lim_{t \rightarrow 0} \phi'(t) = 1, \quad \text{ i } \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \phi'(t) = 0$$

Da bi (2.26) bilo uistinu minimum od $E(x, z)$ s obzirom na z mora vrijediti

$$\frac{d^2}{dz^2} E(x, z) = \Psi''(z) = \Psi''(\phi'(x^2)) > 0 \quad (2.33)$$

Deriviramo (2.28) s obzirom na x

$$\Psi''(\phi'(x^2)) = -\frac{1}{\phi''(x^2)} \quad (2.34)$$

A desna strana je veća od 0 jer vrijedi $\phi''(x) < 0$. □

Više o procesu odskočnika, problemu robusne procjene i njihovom odnosu može se naći u [2]. Za uobičajene ρ -funkcije (uključujući Geman-McClure funkciju) vrijede uvjeti gornjeg teorema.

2.3 Računanje

U [4] postavljaju problem robusne analize glavnih komponenti kao proces odskočnika (2.17)

$$\min_{A, Y, \mu} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p \left[L_{ki} \frac{(x_{ki} - \mu_k - a^k y_i)^2}{\sigma_k^2} + \Psi(L_{ki}) \right] \quad (2.35)$$

Pokazano je da je to ekvivalentno problemu robusne procjene (2.16)

$$\min_{A, Y, \mu} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^p \rho(x_{ki} - \mu_k - a^k y_i, \sigma_k) \quad (2.36)$$

uz dodane uvjete i adekvatan par ρ -funkcije iz problema robusne procjene i Ψ -funkcije iz procesa odskočnika. Mora vrijediti odnos (2.19) i (2.27) između Ψ i ρ -funkcije, tj.

$$\rho(x) = \inf_{0 \leq z \leq 1} (zx^2 + \Psi(z)) \quad (2.37)$$

$$\Psi' \left(\frac{\rho'(x)}{2x} \right) = -x^2 \quad (2.38)$$

u slučaju kada je σ poznata i fiksirana. Odnosno, u slučaju kada se i σ mijenja ovisno o podacima

$$\rho(x, y) = \inf_{0 \leq z \leq 1} \left(z \frac{x^2}{y^2} + \Psi(z) \right) \quad (2.39)$$

$$\Psi' \left(\frac{\sigma^2 \rho'(x, \sigma)}{2x} \right) = -\frac{x^2}{\sigma^2} \quad (2.40)$$

pri čemu se druga jednadžba dobije analognim računom kao u početku dokaza teorema 2.2.2.

Već smo najavili da ćemo koristiti Geman-McClure ρ -funkciju koja se nerijetko koristi i pokazano je da dobro radi ([4]). Također, za razliku od nekih drugih ρ -funkcija, dva puta je diferencijabilna što je korisno u ovom radu i za mnoge druge optimizacijske metode. Pokažimo da je $\Psi(z) = (\sqrt{z} - 1)^2$ njoj pripadajuća Ψ -funkcija.

Propozicija 2.3.1. *Ako se u procesu robusne procjene koristi Geman-McClure ρ -funkcija $\rho(x, \sigma) = \frac{x^2}{x^2 + \sigma^2}$, Ψ -funkcija pripadajućeg procesa odskočnika je $\Psi(z) = (\sqrt{z} - 1)^2$.*

I obratno, ako se u procesu odskočnika koristi gornja funkcija Ψ , pripadajuća ρ -funkcija u procesu robusne procjene je Geman-McClure funkcija.

Dokaz. Krenimo prvo od problema robusne procjene i dane funkcije ρ .

Prva derivacija od $\Psi(z) = (\sqrt{z} - 1)^2$ je

$$\Psi'(z) = \frac{\sqrt{z} - 1}{\sqrt{z}} \quad (2.41)$$

Prva derivacija od ρ -funkcije je

$$\frac{d\rho}{dx}(x, \sigma) = \frac{2x\sigma}{(x^2 + \sigma^2)^2} \quad (2.42)$$

Kada uvrstimo to u (2.40)

$$\Psi' \left(\left(\frac{\sigma^2}{\sigma^2 + x^2} \right)^2 \right) = \frac{\frac{\sigma^2}{\sigma^2 + x^2} - 1}{\frac{\sigma^2}{\sigma^2 + x^2}} = -\frac{x^2}{\sigma^2} \quad (2.43)$$

time smo zadovoljili uvjet da je gornja Ψ -funkcija upravo ona Ψ -funkcija iz ekvivalentnog proces odskočnika.

Neka je sada dan proces odskočnika sa Ψ -funkcijom kao gore.

Trebamo pokazati da je

$$\rho(x, \sigma) = \inf_{0 \leq z \leq 1} \left(z \frac{x^2}{\sigma^2} + (\sqrt{z} - 1)^2 \right) \quad (2.44)$$

Definirat ćemo funkciju $f : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}$ kao

$$f(z) = z \frac{x^2}{\sigma^2} + (\sqrt{z} - 1)^2 \quad (2.45)$$

Tražimo stacionarne točke te funkcije

$$0 = f'(z_s) = \frac{x^2}{\sigma^2} + 1 - \frac{1}{\sqrt{z_s}} \Rightarrow \sqrt{z_s} = \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + x^2} \quad (2.46)$$

$$z_s = \left(\frac{\sigma^2}{\sigma^2 + x^2} \right)^2 \quad (2.47)$$

Lako se provjeri da je $f''(z) = \frac{1}{2\sqrt{z}^3} > 0$ i $0 \leq z_s \leq 1$, stoga je z_s minimum funkcije f .

Uvrstimo u (2.44)

$$\rho(x, \sigma) = \left(\frac{\sigma^2}{x^2 + \sigma^2} \right)^2 \frac{x^2}{\sigma^2} + \left(\frac{\sigma^2}{x^2 + \sigma^2} - 1 \right)^2 = \frac{\sigma^2 x^2}{(x^2 + \sigma^2)^2} + \frac{x^4}{(x^2 + \sigma^2)^2} \quad (2.48)$$

$$= \frac{x^2(\sigma^2 + x^2)}{(x^2 + \sigma^2)^2} = \frac{x^2}{x^2 + \sigma^2} \quad (2.49)$$

što je upravo Geman-McClure ρ -funkcija. □

Želimo zapisati problem robusne estimacije kao težinski problem najmanjih kvadrata. Pritom koristimo Geman-McClure funkciju $\rho(t, \sigma) = \frac{t^2}{t^2 + \sigma^2}$, $\psi(t, \sigma) = \frac{2t\sigma^2}{(t^2 + \sigma^2)^2}$ i oznaku $\tilde{e}_{ki} = x_{ki} - \mu - a^k y_i$. Elementi matrice težina računaju se kao

$$w_{ki} = \frac{\psi(\tilde{e}_{ki}, \sigma_k)}{\tilde{e}_{ki}} = \frac{2\sigma_k^2}{(\tilde{e}_{ki}^2 + \sigma_k^2)^2} \quad (2.50)$$

Sada je

$$E(\mathbf{A}, \mathbf{Y}, \mu, \sigma)_{wpca} = \sum_{i=1}^n (x_i - \mu - \mathbf{A}y_i)^\top \mathbf{W}_i (x_i - \mu - \mathbf{A}y_i) \quad (2.51)$$

$$= \sum_{k=1}^p (x^k - \mu_k \mathbf{1}_n - \mathbf{Y}^\top a^k)^\top \mathbf{W}^k (x^k - \mu_k \mathbf{1}_n - \mathbf{Y}^\top a^k) \quad (2.52)$$

gdje su x_i i y_i i -ti stupci u matricama \mathbf{X} i \mathbf{Y} redom, a x^k i a^k k -ti retci u matricama \mathbf{X} i \mathbf{A} redom. $\mathbf{W}_i \in \mathbb{R}^{p \times p} = \text{diag}(w_i)$ su dijagonalne matrice koje sadrže težine za x_i , dok su $\mathbf{W}^k \in \mathbb{R}^{n \times n} = \text{diag}(w^k)$ dijagonalne matrice sa težinama za k -ti po redu element u svim uzorcima (x^k).

Da bismo našli minimum, deriviramo (2.51) s obzirom na μ ,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i (x_i - \mu - \mathbf{A}y_i) &= 0 \\ \sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i \mu &= \sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i (x_i - \mathbf{A}y_i) \\ \mu &= \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i^{-1} \right)^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i (x_i - \mathbf{A}y_i) \end{aligned}$$

s obzirom na y_i za svaki $i = 1, 2, \dots, n$

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^\top \mathbf{W}_i (x_i - \mu - \mathbf{A}y_i) &= 0 \\ (\mathbf{A}^\top \mathbf{W}_i \mathbf{A})y_i &= \mathbf{A}^\top \mathbf{W}_i (x_i - \mu)\end{aligned}$$

te (2.52) s obzirom na a^k za svaki $k = 1, 2, \dots, p$

$$\begin{aligned}\mathbf{Y}\mathbf{W}^k (x^k - \mu_k \mathbf{1}_n - \mathbf{Y}^\top a^k) &= 0 \\ (\mathbf{Y}\mathbf{W}^k \mathbf{Y}^\top) a^k &= \mathbf{Y}\mathbf{W}^k (x^k - \mu_k \mathbf{1}_n)\end{aligned}$$

Iz ovoga dobivamo sljedeći sustav jednadžbi nužnih uvjeta za minimum:

$$\mu = \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i^{-1} \right) \sum_{i=1}^n \mathbf{W}_i (x_i - \mathbf{A}y_i) \quad (2.53)$$

$$(\mathbf{A}^\top \mathbf{W}_i \mathbf{A})y_i = \mathbf{A}^\top \mathbf{W}_i (x_i - \mu) \quad \forall i = 1, 2, \dots, n \quad (2.54)$$

$$(\mathbf{Y}\mathbf{W}^k \mathbf{Y}^\top) a^k = \mathbf{Y}\mathbf{W}^k (x^k - \mu_k \mathbf{1}_n) \quad \forall k = 1, 2, \dots, p \quad (2.55)$$

Napomena 2.3.2. Premda težine ovise o $\tilde{e}_{ki} = x_{ki} - \mu - a^k y_i$, težine će za svako ponavljanje biti fiksirane u odnosu na prethodni iznos \tilde{e}_{ki} zbog čega ih pri gornjim derivacijama smatramo fiksima.

Rješavamo koristeći algoritam najmanjih kvadrata s iterativnim ažuriranjem težina (IRLS).

Algoritam funkcionira na sljedeći način. Prvo se daje početna procjena baze $\mathbf{A}^{(0)}$, $\mathbf{Y}^{(0)}$ te sredine $\mu^{(0)}$. Zatim se računa parametar skaliranja σ i početne greške $\tilde{e}_{ki}^{(0)}$. Nakon toga možemo izračunati matricu težina $\mathbf{W}^{(1)}$ koju koristimo za alterirajuću minimizaciju $y_i^{(1)}$ i $(a^k)^{(1)}$ ($\forall i, k$) i $\mu^{(1)}$ koristeći jednadžbe (2.53) - (2.55). Kada $y_i^{(1)}$, $(a^k)^{(1)}$ i $\mu^{(1)}$ iskonvergiraju, računaju se nove greške $\tilde{e}_{ki}^{(1)}$ i nova matrica težina $\mathbf{W}^{(2)}$ i nastavlja istim postupkom do konvergencije algoritma. Shema algoritma je dana u nastavku:

Algoritam 1 Najmanji kvadrati s iterativnim ažuriranjem težina**ulaz:** matrica podataka \mathbf{X} 1: izračunaj $\mathbf{A}, \mathbf{Y}, \mu, \sigma$ 2: **dok** ne iskonvergira \mathbf{A} , **ponovi**3: $e_{ki} \leftarrow x_{ki} - \mu_k - a^k y_i$ 4: $w_{ki} \leftarrow \frac{2\sigma_k^2}{(e_{ki}^2 + \sigma_k^2)^2}$ 5: $\mu_k \leftarrow \frac{\sum_{j=1}^n w_{kj}(x_{kj} - a^k y_j)}{\sum_{j=1}^n w_{kj}}$ 6: $a^k \leftarrow \left(\sum_{j=1}^n w_{kj} y_j y_j^\top \right)^{-1} \sum_{j=1}^n w_{kj} (x_{kj} - \mu_k) y_j$ 7: $\mathbf{Y} = [y_1, \dots, y_n]$ gdje je $y_i \leftarrow \left(\sum_{j=1}^d w_{ji} (a^j)^\top a^j \right)^{-1} \sum_{j=1}^d w_{ji} (x_{ji} - \mu_j) a^j$ **izlaz:** $\mu, \mathbf{A}, \mathbf{Y}, \mathbf{W}$ **Inicijalizacija**

Black i De la Torre [4] predlažu slijedeće - procijeniti μ kao robusnu sredinu minimizirajući $E_{rsredina}(\tilde{\mu}) = \sum_i e_{rpca}(x_i - \tilde{\mu}, \sigma)$. Međutim, također tvrde da je obično dovoljno uzeti medijan ili čak aritmetičku sredinu. $\mathbf{A}^{(0)}$ i $\mathbf{Y}^{(0)}$ računamo kao rješenja klasične analize glavnih komponenti.

Parametar skaliranja σ

Parametar σ kontrolira oblik ρ -funkcije čime određuje koje ćemo vrijednosti tretirati kao odskočnike. Točka nakon koje se smanjuje utjecaj vrijednosti t u ρ -funkciji je ona u kojoj druga derivacija ρ -funkcija poprima vrijednost 0 [2]. U slučaju Geman-McClure funkcije, druga derivacija

$$\frac{d^2\rho}{dt^2} = \frac{d\psi}{dt} = -\frac{2\sigma^2(3t^2 - \sigma^2)}{(t^2 + \sigma^2)^3}$$

je jednaka nuli u točkama $\pm \frac{\sigma}{\sqrt{3}}$. Stoga, kada je apsolutna vrijednost pogreške $|e_{ki}|$ veća od $\frac{\sigma_p}{\sqrt{3}}$, utjecaj piksela k na sliku i se smanjuje.

Sam parametar σ procjenjujemo za svaki pojedini piksel k koristeći apsolutnu devijaciju medijana - MAD (2.9). Konkretno, ovdje računamo σ_k kao

$$\sigma_k = \beta \max \left(1.4826 \operatorname{med}_R \left(\left| e^k - \operatorname{med}_R(|e^k|) \right| \right), \sigma_{min} \right) \quad (2.56)$$

gdje R označava neku regiju oko piksela k , σ_{min} je MAD izračunat na čitavoj slici, β je konstanta koja skalira σ_k na 1 do 2.5 puta veću vrijednost od procjene, a e^k je početna pogreška. U ovom radu regija oko piksela koju ćemo promatrati uključivat će već spomenute najbliže susjede prvog reda.

Početna pogreška se računa na sljedeći način. Nakon izračuna klasičnog PCA podataka, izračuna se broj baza potrebnih da bi se zadržalo 55% energije E_{pca} . Odnosno, tražimo najmanji mogući $l \in \mathbb{N}$ takav da vrijedi

$$\frac{\sum_{i=1}^l \|Ay_i\|_2^2}{\sum_{i=1}^l \|x_i\|_2^2} \geq 0.55 \quad (2.57)$$

U klasičnoj analizi glavnih komponenti to možemo izračunati i koristeći (1.6). Kada pronađemo traženi l izračunamo matricu pogrešaka \mathbf{E} . e^k je vektor redak u toj matrici.

Generalno, funkcija E_{rpca} nije konveksna i može "zaglaviti" u lokalnom minimumu. Da bismo to spriječili koristimo shemu **simuliranog kaljenja** (eng. *simulated annealing*). Kako ta metoda funkcionira? Započinje sa odabirom dovoljno velikog višekratnika od σ takav da niti jedan piksel nije odskočnik, a potom se σ sa svakom iteracijom postupno smanjuje do vrijednosti određene sa MAD (2.56) čime smanjuje utjecaj odskočnika. Detalji ove metode izlaze iz opsega ovog rada, ali osnovne informacije mogu se pronaći u [10].

2.4 Kriterij zaustavljanja

Predloženi algoritam iterativan pa je potrebno nametnuti kriterij zaustavljanja. Moguće je koristiti standardne kriterije (provjera je li razlika ili norma razlike između dvije uzastopne procjene nekog parametra manja od unaprijed određenog praga i slično). U ovoj metodi očekujemo da konvergira prema potprostoru, stoga Black i De la Torre smatraju da dobar kriterij zaustavljanja čini mjera glavnih kuteva [5] (eng. *principal angles*) između dva uzastopna potprostora $\mathbf{A}^{(i)}$ i $\mathbf{A}^{(i+1)}$.

Definicija 2.4.1. Neka su V i W potprostori od \mathbb{R}^m čije dimenzije zadovoljavaju

$$D = \dim(V) \geq \dim(W) = d \geq 1 \quad (2.58)$$

Glavni kutevi $\{\theta_k\}_{k=1}^d$ između V i W definiraju se rekursivno kao

$$\cos(\theta_k) = v_k^\top w_k = \max_{\substack{v \in V, \|v\|_2=1 \\ v \perp v_1, \dots, v_{k-1}}} \max_{\substack{w \in W, \|w\|_2=1 \\ w \perp w_1, \dots, w_{k-1}}} v^\top w \quad (2.59)$$

Vektori v_1, \dots, v_d i w_1, \dots, w_d zovu se *glavni vektori* između potprostora V i W .

Za glavne kuteve vrijedi $0 \leq \theta_1 \leq \dots \leq \theta_d \leq \pi/2$.

Najveći glavni kut povezan je sa idejom udaljenosti između jednakodimenzionalnih potprostora. Ako je $D = d$, vrijedi

$$d(V, W) = \sqrt{1 - \cos^2(\theta_d)} = \sin(\theta_d) \quad (2.60)$$

Sljedeći teorem će pokazati kako jednostavno izračunati glavne kuteve uz pomoć QR i SVD dekompozicije.

Teorem 2.4.2. *Neka su V i W potprostori od \mathbb{R}^m dimenzija D i d redom i neka su A i B realne matrice punog ranga D , tj. d reda $m \times D$, tj. $m \times d$ takve da vrijedi $\text{Im}(A) = V$ i $\text{Im}(B) = W$.*

Za kratku QR faktorizaciju $A = Q_A R_A$ i $B = Q_B R_B$, postoje vektori u_k i s_k ($k = 1, \dots, \min(d, D)$) takvi da je

$$\begin{aligned} f_k &= Q_A * u_k \\ g_k &= Q_B * v_k \end{aligned}$$

gdje su f_k i g_k iz glavni vektori iz definicije (2.4.1).

Dokaz. Bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti $d \leq D$. Izračunajmo dekompoziciju singularne vrijednosti od $Q_A^\top Q_B$:

$$Q_A^\top Q_B = Y \Sigma Z^\top = \sum_{i=1}^d \sigma_i y_i z_i^\top$$

S obzirom da je $\|Q_A^\top Q_B\|_2 \leq 1$, sve singularne vrijednosti su između 0 i 1 te možemo zapisati $\sigma_i = \cos \theta_i$ za $i = 1, \dots, d$.

Označimo sa f'_k stupac vektore u matrici $Q_A Y$, odnosno sa g'_k stupac vektore u matrici $Q_B Z$:

$$Q_A Y = [f'_1 \ f'_2 \ \dots \ f'_d] \quad (2.61)$$

$$Q_B Z = [g'_1 \ g'_2 \ \dots \ g'_d]. \quad (2.62)$$

Ove matrice imaju ortonormalne stupce.

Za proizvoljne jedinične vektore $v \in V$ i $w \in W$ postoje jedinični vektori $u \in \mathbb{R}^D$ i $s \in \mathbb{R}^d$ takvi da je $v = Q_A u$ i $w = Q_B s$. Stoga,

$$v^T w = (Q_A u)^T (Q_B s) = u^T (Q_A^T Q_B) s = u^T (Y \Sigma Z^T) s \quad (2.63)$$

$$= (Y^T u)^T \Sigma (Z^T s) = \sum_{i=1}^d \sigma_i (y_i^T u) (z_i^T s) \quad (2.64)$$

Ovaj izraz postiže maksimalnu vrijednost $\sigma_1 = \cos \theta_1$ za $u = y_1$ i $s = z_1$. Slijedi da je $f_1 = Q_A y_1 = f'_1$ i $g_1 = Q_B z_1 = g'_1$.

Pretpostavimo sada da je $k > 1$ i da znamo da su prvih $k - 1$ stupaca matrica (2.61) i (2.62) poznati. Da bismo otkrili k -ti stupac, trebamo maksimizirati $v^T w$ ako su $v = Q_A u$ i $w = Q_B s$ jedinični vektori takvi da vrijedi $v \perp f_1, \dots, f_{k-1}$ i $w \perp g_1, \dots, g_{k-1}$.

Iz (2.63) i gornjih uvjeta slijedi

$$v^T w = \sum_{i=k}^d \sigma_i (y_i^T u) (z_i^T s) \leq \sigma_k \sum_{i=k}^d |y_i^T u| |z_i^T s|$$

Izraz poprima maksimalnu vrijednost $\sigma_k = \cos \theta_k$ za $u = y_k$ i $s = z_k$. Slijedi $f_k = Q_A y_k = f'_k$ i $g_k = Q_B z_k = g'_k$.

□

Dakle, za $A \in \mathbb{R}^{m \times D}$ i $B \in \mathbb{R}^{m \times d}$ ($D \geq d$) svaku sa linearno nezavisnim stupcima glavni kutevi $\theta_1 \geq \dots \geq \theta_d$ između $Im(A)$ i $Im(B)$ mogu se izračunati na sljedeći način. Prvo se izračuna skraćena QR faktorizacija od $A = Q_A R_A$ i $B = Q_B R_B$. Označimo $C = Q_A^T Q_B$. Potom se izračuna SVD od $C = Y \text{diag}(\cos \theta_k) Z^T$. Glavne vektore f_i i g_i čine prvih d stupaca matrica $Q_A Y$ i $Q_B Z$.

Uz broj baza odabran koristeći (2.57) ponavljamo algoritam IRLS (algoritam 1) do konvergencije. Na kraju je dobivena matrica \mathbf{W} koja sadrži težine svakog piksela u uzorku. Pomoću ovoga je moguće odrediti odskočnike postavljajući vrijednosti od \mathbf{W} na 0 ako $|\tilde{w}_{ki}| > \frac{\sigma_k}{\sqrt{3}}$ i na w_{ki} inače. Time je dobivena nova matrica težina koju ćemo označiti sa \mathbf{W}^* . Sada postupno dodajemo baze i minimiziramo funkciju $E(\mathbf{A}, \mathbf{Y}, \mu) = \|\mathbf{W}^*(\mathbf{X} - \mu \mathbf{1}_n^T - \mathbf{A}\mathbf{Y})\|$ na isti način kao do sada (samo sa matricom fiksnih težina \mathbf{W}^*). Dodajemo baze dok postotak zadržane varijabilnosti ξ nije bar 0.9 za ξ definiran kao

$$\xi = \frac{\sum_{i=1}^n (\mathbf{A}y_i)^T \mathbf{W}_i^* (\mathbf{A}y_i)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^T \mathbf{W}_i^* (x_i - \mu)} \quad (2.65)$$

Sumirajmo sada čitav algoritam:

Algoritam 2 Robusna analiza glavnih komponenti uz iterativno ažuriranje težina

ulaz: matrica podataka \mathbf{X} , ϵ

- 1: Izračunaj početnu sredinu $\mu^{(0)}$ i rješenja klasične analize glavnih komponenti ($\mathbf{A}^{(0)}$, $\mathbf{Y}^{(0)}$) koristeći SVD
 - 2: Odaberi početan broj baza koristeći (2.57) i izračunaj matricu pogrešaka \mathbf{E}
 - 3: Izračunaj parametar skaliranja σ (2.56), to će biti σ_{kon} . Pomnoži ga s konstantom $K > 0$ dovoljno velikom tako da niti jedan podatak nije odskočnik, to će biti σ_{poc}
 - 4: **dok** glavni kut između $\mathbf{A}^{(l)}$ i $\mathbf{A}^{(l+1)}$ nije manji od ϵ , **ponovi**
 - 5: algoritam 1 sa kontinuiranim smanjivanjem σ_{poc} dok ne dođe do vrijednosti σ_{kon}
 - 6: Izračunaj W^*
 - 7: Nastavi dodatavati baze i rješavati za A , Y i μ dok je $\xi < 0.9$ za ξ iz (2.65)
-

Poglavlje 3

Primjena

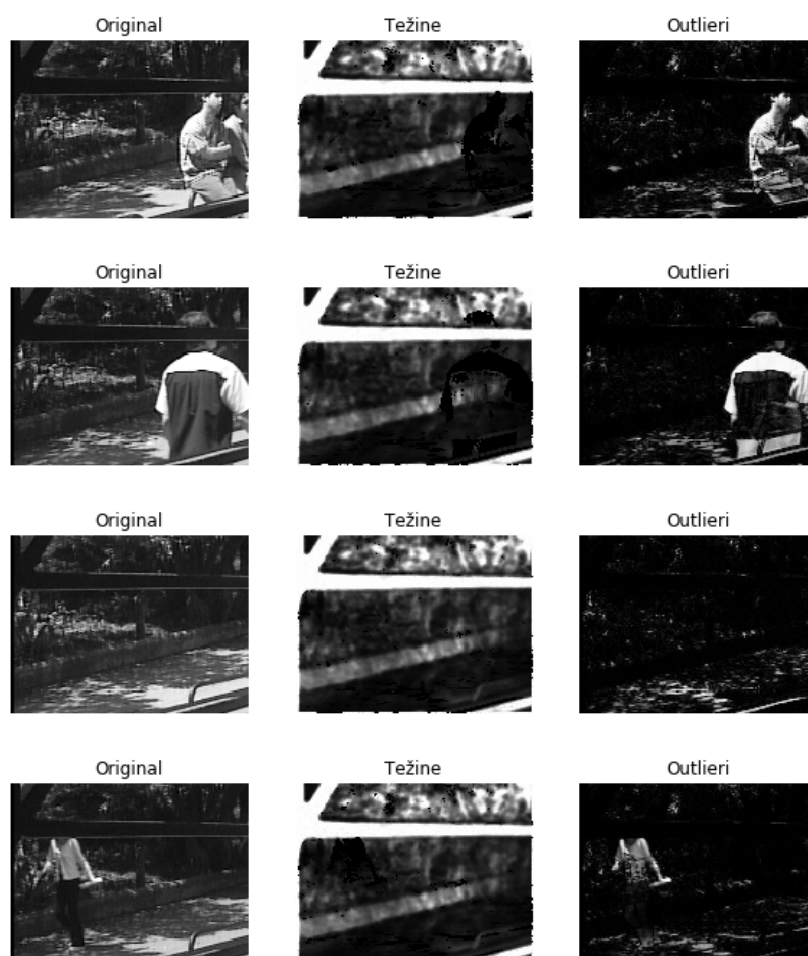
3.1 Podaci snimljeni statičnom kamerom

Algoritam je primijenjen na dva skupa podataka. Prvi čine 260 fotografija dimenzija 120×160 snimljene statičnom kamerom tijekom jednog dana. Osim promjena u osvjetljenju tokom dana, 40% fotografija sadrži ljude u različitim dijelovima kadra. Većina njih brzo prolazi kroz kadar, međutim neki ostaju u kadru tijekom nekoliko fotografija. Primjenjena je klasična analiza glavnih komponenti i robusna analiza glavnih komponenti. Na slici 3.1 možemo vidjeti na nekoliko primjera razliku između rekonstrukcije dobivene klasičnim PCA i one dobivene s RPCA. Oba dobro prate promjenu u osvjetljenju, međutim na rezultatima dobivenim sa klasičnom analizom glavnih komponenti na mjestima na kojima se nalaze ljudi slika je često zamučena ili se čak može i razaznati lik osobe. Za razliku od klasičnog PCA, robusna metoda veoma dobro izolira pozadinu. Za prve iteracije algoritma RPCA (određivanje finalne matrice težina \mathbf{W}^*) koristimo 8 baza, a same slike rekonstruiramo sa 24 baze.

Koristeći RPCA možemo izgraditi model pozadine koji se može koristiti da bi detektirao i pratio kretanju pri čemu bilježi varijaciju vanjskog osvjetljenja. Nekoliko primjera dano je na slici 3.1. U prvom stupcu nalazi se originalna slika, u drugom težine za pojedine piksele te slike, a u trećem procijenjeni odskočnici te slike. U trećem stupcu možemo primijetiti da smo na ovaj način izdvojili ljudske figure, ali i neke pozadinske promjene poput kretanja sjena stabala.



Slika 3.1: Originalne slike sa statične kamere, rekonstrukcija koristeći klasični PCA, rekonstrukcija koristeći RPCA

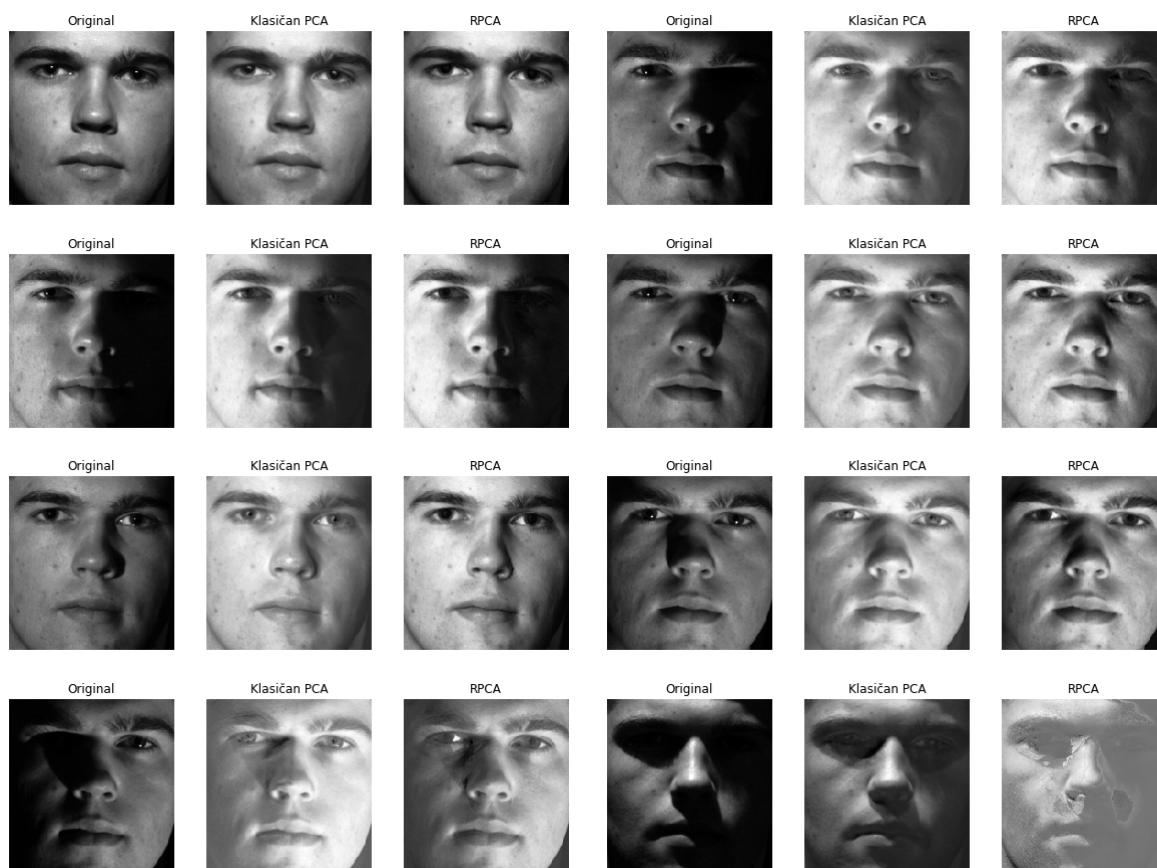


Slika 3.2: Originalne slike sa statične kamere, prikaz težina iz završne matrice težina W^* te prikaz odskočnika

3.2 Podaci iz *Yale B Extended* skupa podataka

Drugi skup podataka na kojem ćemo primijeniti robusnu analizu glavnih komponenti dolaze iz skupa podataka *Extended Yale B* ([14], [11]). Taj skup podataka sadrži slike 38 subjekata koje su slikane pod različitim osvjetljenjima i raznim ekspresijama lica. Ovdje koristimo 45 slika jednog subjekta u istoj pozi izrezane u dimenzije 190×180 tako da se vidi samo lice. Premda rekonstrukcija dobivena robusnom analizom glavnih komponenti u

većini slučajeva daje bolje rezultate, razlika u odnosu na klasičnu analizu glavnih komponenti nije velika. Početni broj baza je 2, a za finalnu rekonstrukciju koristimo 8 baza.

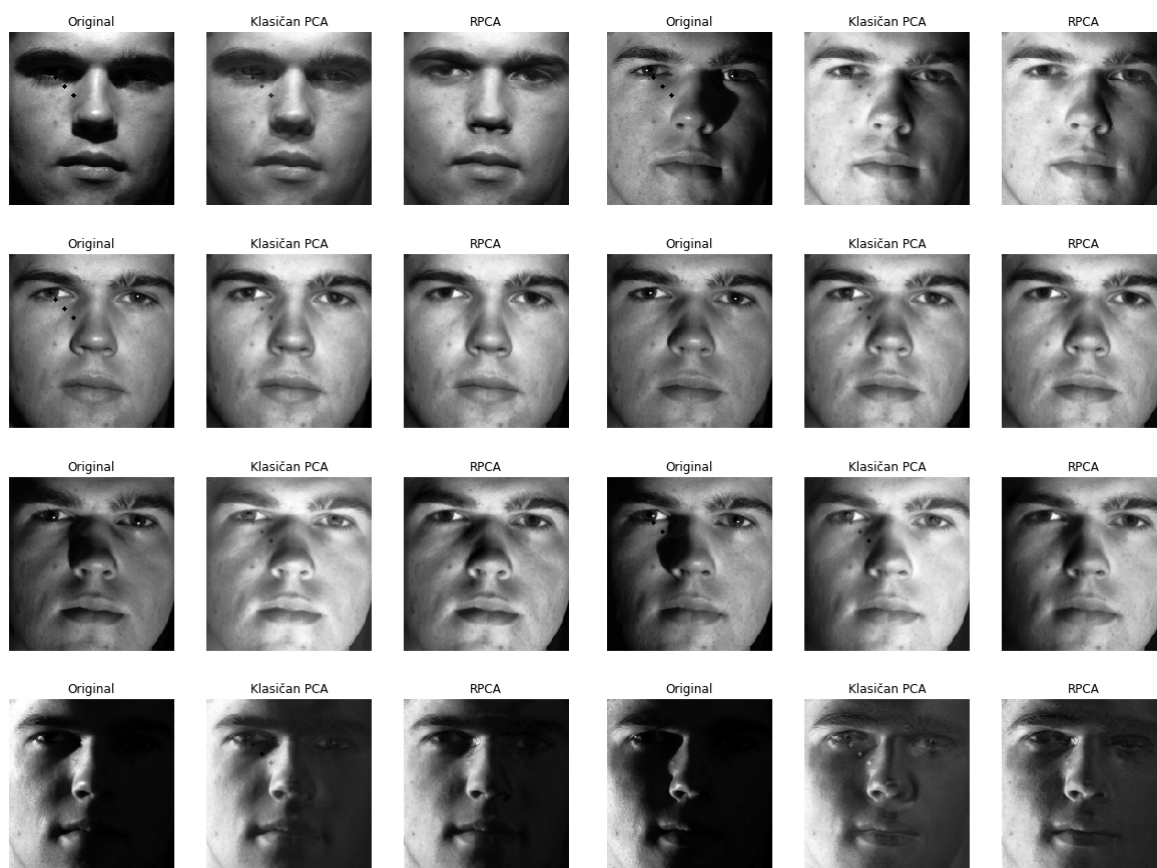


Slika 3.3: Originalne slike iz Yale B skupa podataka, rekonstrukcija dobivena klasičnim PCA i rekonstrukcija dobivena s RPCA

Za razliku od prvog skupa podataka u kojem je broj odskočnika bio znatno manji, ovdje metoda teže razaznaje odskočnike - pogotovo na dijelovima gdje ih ima puno grupiranih (veće sjene koje pokrivaju dobar dio slike).

Promotrimo kako metoda djeluje ako dodamo manje, odvojene odskočnike. Na 20% nasumično odabranih slika dodane su tri crne točke (stupci "Original" slike 3.2) nakon čega je ponovno pokrenut algoritam sa istim brojem početnih i finalnih baza. Neki od rezultata su prikazani na slici 3.2.

Robusna analiza glavnih komponenti jasno prepoznaje tri točke kao odskočnike i ne prikazuje ih niti na jednoj rekonstrukciji. U drugu ruku, klasična analiza komponenti ne



Slika 3.4: Slike iz Yale B skupa podataka sa dodanim odskočnicima, rekonstrukcija dobivena klasičnim PCA i rekonstrukcija dobivena s RPCA

samo da ih rekonstruira u slikama koje su ih imale na početku, već ih dodaje i nekim slikama koje ih nisu imale. Na ova dva primjera možemo primjetiti da metoda daje bolje rezultate nad podacima koji imaju manje i izoliranije odskočnike. Uz dodatnu modifikaciju algoritma koja je izvan opsega ovog rada moguće je postići i nešto bolje rezultate ([12], [4]).

Bibliografija

- [1] M. Bilodeau i David Brenner, *Theory of Multivariate Statistics*, 2010, ISBN 978-0-387-98739-2.
- [2] M. Black i A. Rangarajan, *On the Unification Line Processes, Outlier Rejection, and Robust Statistics with Applications in Early Vision*, International Journal of Computer Vision **19** (1996), 57–91.
- [3] R. Christensen, *Advanced Linear Modeling: Statistical Learning and Dependent Data*, Springer Texts in Statistics, Springer International Publishing, 2019, ISBN 9783030291631.
- [4] F. De la Torre i M. Black, *A Framework for Robust Subspace Learning*, Int J Comput Vis. **54** (2003).
- [5] G.H. Golub i C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, Johns Hopkins Studies in the Mathematical Sciences, Johns Hopkins University Press, 2013, ISBN 9781421407944.
- [6] D.C. Hoaglin, F. Mosteller i J.W. Tukey, *Exploring Data Tables, Trends, and Shapes*, Wiley Series in Probability and Statistics, Wiley, 2011, ISBN 9781118150696.
- [7] M. Huzak, *Primijenjena statistika - skripta s predavanja*, 2022, <https://web.math.pmf.unizg.hr/nastava/ps/index.php?sadrzaj=predavanja.php>, pristup 29.6.2023.
- [8] R. A. Johnson i D. W. Wichern, *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Prentice-Hall, Inc., USA, 1988, ISBN 0130411469.
- [9] I.T. Jolliffe, *Principal Component Analysis*, Springer Series in Statistics, Springer, 2002, ISBN 9780387954424.
- [10] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt i M. P. Vecchi, *Optimization by Simulated Annealing*, Science **220** (1983), br. 4598, 671–680.

- [11] K. Lee, J. Ho i D. Kriegman, *Acquiring Linear Subspaces for Face Recognition Under Variable Lighting*, IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence **27** (2005), 684–98.
- [12] A. Sobral, T. Bouwmans i E. Zahzah, *LRSLibrary: Low-Rank and Sparse tools for Background Modeling and Subtraction in Videos*, Robust Low-Rank and Sparse Matrix Decomposition: Applications in Image and Video Processing, CRC Press, Taylor and Francis Group., 2015.
- [13] R.E. Vidal, *Generalized Principal Component Analysis (GPCA): An Algebraic Geometric Approach to Subspace Clustering and Motion Segmentation*, Memorandum (University of California, Berkeley, Electronics Research Laboratory), Electronics Research Laboratory, College of Engineering, University of California, 2003.
- [14] Yale, *The Extended Yale Face Database B*, (2001), <http://vision.ucsd.edu/~iskwak/ExtYaleDatabase/ExtYaleB.html>.

Sažetak

Analiza glavnih komponenti veoma je koristan i poznat alat za smanjivanje dimenzija početnog uzorka. Glavna ideja je rekonstruirati originalni uzorak u manjem, afinom potprostoru koji će sadržavati maksimalnu količinu početne varijance. S obzirom da počima na metodi najmanjih kvadrata koja je notorno osjetljiva na odskočnike, i činjenicu da u praksi imamo posla sa sve više i većim podacima koje ne možemo preprocesirati ručno, postoji potreba za razvoj robusnih metoda analize glavnih komponenti (RPCA).

U ovom radu prvo se prisjećamo klasične analize glavnih komponenti. Iznosimo neka od najrelevantnijih svojstva glavnih komponenti i neke prilagodbe i specifičnosti za slučaj kada uzorak dolazi iz nepoznate populacije.

Potom gradimo teoriju robusne statistike za algoritam robusnih glavnih komponenti. Počinjemo s M-procjeniteljima ("maximum-likelihood like") i W-procjeniteljima ("weight like") kao robusnim alternativama za klasičnu metodu minimizacije najmanjih kvadrata. Poput svih M-procjenitelja, metoda značajno ovisi o parametru skaliranja σ kojega također moramo robusno procijeniti. On će biti vrijednost spram koje procjenjujemo je li pojedini piksel odskočnik. Metoda koju ovdje koristimo je apsolutna devijacija medijana (MAD) što je robusna mjera varijabilnosti podataka. Nadalje, dajemo dvije formulacije ciljne funkcije za naš RPCA i dokazujemo da je rješenje intuitivnije funkcije također rješenje funkcije koju je znatno lakše riješiti uz par dodanih uvjeta. Na kraju, sve to sakupljamo u algoritam baziran na metodi najmanjih kvadrata s iterativnim ažuriranjem težina (IRLS)

Primjenjujemo algoritam na dva skupa podataka i uspoređujemo ga s algoritmom klasične analize glavnih komponenti. Jedan skup podataka čine slike snimljene statičnom kamerom tokom jednog dana koja, osim promjene u iluminaciji, sadržava i slike raznih ljudi dok prolaze kroz kadar. Drugi skup podataka je dio *Extended Yale B* uzorka i sadržava izrezano lice jednog od subjekata u istoj pozi sa drugačijim osvjetljenjem. Zaključujemo da algoritam prilikom rekonstrukcije originalnih podataka bolje eliminira odskočnike iz prvog skupa podataka jer ih je manje i više su izolirani. U drugom slučaju, i dalje većinski dobivamo bolje rezultate od klasičnog PCA, ali algoritam ne uspijeva u potpunosti ukloniti sjenčanje. Međutim, kada smo dodali tri manje grupe odskočnika na isto mjesto površ 20% slika, algoritam ih u potpunosti uspijeva eliminirati.

Summary

Principal component analysis is a very useful and well known tool for dimension reduction of the original dataset. The main idea behind it is to reconstruct the original dataset in a smaller affine subspace which will retain the maximum amount of variance. Considering the fact that it relies on the least-squares technique, which is notoriously sensitive to outliers, and the fact that in real-life situations we are dealing with bigger and more data we are unable to preprocess manually, there is a need for developing a robust principal component analysis (RPCA).

In this paper first we recall the classical principal component theory. We state some of the most relevant features of principal components and explain some adjustments or specificities in the case of data coming from an unknown population.

Afterwards, we build the theory of robust statistics for the robust principal component algorithm. Starting with M-estimators ("maximum-likelihood like") and W-estimators ("weight like") as a robust substitute for the classical least squares minimization. Like all M-estimators, the method depends heavily on scale parameter σ which has to be estimated as well. It provides a measure vis-a-vis which we can decide which element is or isn't an outlier. The method we use here is median absolute deviation (MAD) which is a robust measure of variability of data. Further on, we give two formulations of the objective function for our RPCA and prove that the minimization solution of the more intuitive function is also the solution of the easier-to-solve function with a few simple conditions. In the end we gather it all into an algorithm based on iteratively reweighted least squares (IRLS).

We apply our algorithm to two datasets and compare it to the classical PCA algorithm. One dataset is a one day recording of a static camera that, aside from the illumination changing, has different people walking in and out of the frame. The other is part of the *Extended Yale B* dataset, and includes a cropped out face from one of the subjects in the same pose with different lighting. We conclude that the method does a better job eliminating outliers during reconstruction of the first dataset because it had less of them and they were more isolated. In the second case, it still mostly does a better job than the regular PCA, but can't fully remove the shadow. However, when we added three smaller outlier-groups in the same place on top of 20% of pictures, we have seen that it does a great job of removing all of them.

Životopis

Rođena sam 13. studenog 1998. u Zagrebu. Nakon završene XV. gimnazije 2017. godine upisujem preddiplomski sveučilišni studij Matematika na Matematičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu, a godinu nakon i studij Suvremenog plesa na Akademiji dramske umjetnosti u Zagrebu. Po završetku preddiplomskog studija Matematike 2020. upisujem diplomski studij Matematička statistika. Godinu nakon završavam i preddiplomski studij na ADU. Tijekom studija obavljam nekoliko stručnih praksi - prvo u direkciji za razvoj aplikacijskih sustava (2020.) u Hrvatskoj narodnoj banci, potom u direkciji za financijsku stabilnost također u HNB-u (2021.), te u odjelu kognitivnog računanja u A1 (2022.). Tijekom 2022. sudjelujem u nastavi predmeta Koreografija 2 na ADU kao asistent-volonter, te radim na tehničkoj produkciji projekta Tome Savić-Gecana u Art Baselu.