

تُنک‌سازی مؤلفه‌های اصلی در حضور نقاط دورافتاده

امیر رزاقی،^۱ موسی گلعلی‌زاده،^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۱۱/۲۸

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۷/۲۰

چکیده:

یکی از معروف‌ترین رویکردهای اکتشافی برای کاهش بُعد و توصیف ساده‌تر منابع اصلی تغییرات، تحلیل مؤلفه‌های اصلی است. با وجود مزایای جالب توجه این روش، به‌کارگیری آن در برخی از مواقع مشکلاتی را به همراه دارد. حضور نقاط دورافتاده در مجموعه داده‌ها، تأثیرهای مخربی بر نتایج این رویکرد دارد که به نظر می‌رسد گونه‌ای از مؤلفه‌های اصلی که اُستوار باشند برای اخذ نتایج معتبر، سودمند است. به علاوه، وجود بارهای میانی در برخی از ترکیبات خطی، تفسیر مؤلفه‌ها را دشوار می‌سازد که در این حالت می‌توان گونه‌ای از تُنک‌سازی مؤلفه‌ها را در نظر گرفت. در این مقاله، برای حصول هم‌زمان مؤلفه‌های اصلی اُستوار و تُنک، رویکرد ترکیبی کارآمدی ارائه و سپس به‌منظور ارزیابی و مقایسه آن با رویکردهای مطرح شده از شبیه‌سازی آماری بهره گرفته می‌شود. در نهایت، ابزارهای مورد اشاره در تحلیل مثال واقعی مرتبط با مجموعه داده‌های جرم و جنایت در آمریکا مورد استفاده قرار می‌گیرد.

واژه‌های کلیدی: تحلیل مؤلفه‌های اصلی، نقاط دورافتاده، تعبیرپذیری مؤلفه‌ها، تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار و تُنک، داده‌های جرم و جنایت.

۱ مقدمه

اساسی در به‌کارگیری رویکرد، PCA وجود نقاط دورافتاده^۴ و عدم تعبیرپذیری^۵ مناسب مؤلفه‌های اصلی است. وجود نقاط دورافتاده در داده‌ها بر بردار میانگین اثر مخربی گذاشته و منجر به بی‌اعتباری نتایج حاصل می‌شود. به نظر می‌رسد اتخاذ روشی اُستوار که به طریق مناسبی با رویکرد PCA تلفیق شده باشد، راه حل معقولی باشد. مشکل دیگر چنین رویکردی، پیچیدگی تفسیر مؤلفه‌های اصلی به‌دست‌آمده است. این امر ناشی از آن است که اکثریت بارها^۶ از لحاظ قدر مطلق، اعدادی نه خیلی کوچک و نه خیلی بزرگ هستند. به نظر می‌رسد در این حالت، گونه‌ای از تُنک‌سازی مؤلفه‌ها که باعث سوق تعدادی از ضرایب

یکی از مسائل مهم در تحلیل داده‌هایی با مجموعه زیادی از متغیر، خلاصه نمودن متغیرها به‌منظور اخذ نتایج مفید از داده‌های اولیه است. از این رو، رویکردی چندمتغیره با هدف کاهش بُعد و توصیف تغییرات موجود در مجموعه داده‌ها روی کار آمد که به رویکرد تحلیل مؤلفه‌های اصلی^۳ (PCA) معروف است (جولیفه، ۲۰۰۲).

علی‌رغم مزیت‌های فراوان ابزار، PCA این رویکرد در برخی از موارد، نتایج معتبری را برای محقق به همراه ندارد (اوریت و هاترن، ۲۰۱۱). بنا به هابرت و دیگران (۲۰۱۶)، دو مشکل

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد آمار، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

^۲ هیأت علمی گروه آمار، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

^۳ Principal components analysis

^۴ Outliers

^۵ Interpretability

^۶ Loadings

(۲۰۰۵). از این رو، روش‌های اُستوار مختلفی پیشنهاد شده‌اند که در ادامه تشریح می‌شوند.

۱.۲ تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار با استفاده از ماتریس کواریانس اُستوار

یکی از مهم‌ترین رویکردهای اُستوارسازی مؤلفه‌های اصلی، استفاده از ماتریس کواریانس اُستوار است. ساخت این ماتریس بر مبنای برآوردگرهایی است که مکان^۹ و پراکنش اُستواری را تولید کنند. یکی از نخستین برآوردگرهای هم‌ردای آفینی برای به دست آوردن این دو معیار در تحلیل چندمتغیره، برآوردگر مینیم دترمینان کواریانس^{۱۰} (MCD) است (روسیوف، ۱۹۸۵). طریقه به دست آوردن برآوردگر MCD بر مبنای یافتن زیرنمونه‌هایی به اندازه h از مجموعه مشاهدات به اندازه n است که ماتریس کواریانس معمول این h مشاهده، کمترین دترمینان ممکن را داشته باشد. از دیدگاه ریاضی، اندازه زیرنمونه‌ها (h) از رابطه

$$h = h_{\alpha} = h(\alpha, n, p) = \lceil 2n_{\tau} - n + 2\alpha(n - n_{\tau}) \rceil, \quad (1)$$

به دست می‌آید که در آن $n, n_{\tau} = \lceil \frac{n+p+1}{2} \rceil$ تعداد کل مشاهدات، p تعداد متغیرهای موجود و α پارامتر عددی کنترل‌کننده اندازه زیرنمونه‌ها برای مینیم شدن دترمینان است که مقادیری بین ۰/۵ تا ۱ را اختیار می‌کند. شایان ذکر است که در تساوی (۱) و همچنین تعریف n_{τ} ، نماد $[]$ نشان‌دهنده جزء صحیح است. اگر چه تعیین مقدار α به سلیقه محقق و طبیعت مسئله بر می‌گردد ولی روسیوف و دریزن (۱۹۹۹) نشان دادند که بیشترین اُستواری برای حالت $\alpha = ۰/۵$ اتفاق می‌افتد. بنا بر این زمانی که $\alpha = ۰/۵$ ، با فراخوانی رابطه (۱)، اندازه زیرنمونه‌ها از رابطه $h_{۰.۵} = \lceil \frac{n+p+1}{2} \rceil$ به دست می‌آید. در نهایت، برآورد مکان و پراکنش چندمتغیره برآوردگر MCD با پارامتر h ، به صورت زیر حاصل می‌شوند:

متغیرها به سمت صفر شود، مفید فایده است. اکنون اگر حالت ترکیبی وجود نقاط دورافتاده و دشواری تعبیر مؤلفه‌ها مد نظر قرار گیرد، آنگاه انتظار می‌رود تلفیق دو راه حل اشاره شده، رویکرد مناسبی در برخورد با مشکل اخیر باشد. بررسی منابع علمی نشان می‌دهد که اولین تحقیق در این‌گونه مسائل، توسط کروکس و دیگران (۲۰۱۳) صورت گرفت که حاصل تلاش آنها ارائه رویکرد تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار تئک^۷ (SRPCA) بود. در ادامه نیز، هابرت و دیگران (۲۰۱۶)، رویکرد تحلیل مؤلفه‌های اصلی تئک اُستوار^۸ (ROSPCA) را پیشنهاد دادند. مقاله حاضر، مروری بر فعالیت‌های ذکر شده و سپس کاربری رویکرد ROSPCA در شبیه‌سازی و مثال واقعی است.

برای ارائه مفاهیم مرتبط با موضوعات مطرح شده در بخش مقدمه، ادامه مقاله به بخش‌های زیر تقسیم شده است. در بخش دوم، مقدمه‌ای از تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار ارائه و سپس روش‌های اُستوارسازی مرور می‌شود. جزئیاتی راجع به روش SRPCA و تشریحی از رویکرد ترکیبی ROSPCA به منظور اُستوارسازی و تئک‌سازی مؤلفه‌های اصلی به‌طور هم‌زمان در بخش سوم ارائه می‌شود. در بخش چهارم، برای ارزیابی رویکرد ROSPCA با رویکردهای قبلی، مطالعه‌ای شبیه‌سازی صورت می‌گیرد و کاربری آن در تحلیل یک مثال واقعی مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتیجه‌گیری کلی از مطالب مطرح شده، پایان بخش مقاله حاضر است.

۲ اُستوارسازی مؤلفه‌های اصلی

حساسیت ماتریس کواریانس به نقاط دورافتاده و در نتیجه تأثیر مخرب آنها بر ماتریس بار، یکی از مشکلات رویکرد PCA کلاسیک است. در واقع، حضور چنین نقاطی سبب می‌شود که مؤلفه‌ها به سمت نقاط دورافتاده کشیده شده و نتوانند تغییرات مشاهدات منظم را به درستی منعکس کنند (هابرت و دیگران،

^۷ Sparse robust PCA

^۸ Robust sparse PCA

^۹ Location

^{۱۰} Minimum covariance determinant

شده ماکسیم باشد. لذا، برای حصول مؤلفه‌های اصلی اُستوار در روش‌های PP از شاخص تصویری اُستوار استفاده می‌شود. لازم به اشاره است که برآوردهای میانه انحراف مطلق^{۱۴} (MAD) و Q_n از جمله برآوردهای مقیاس اُستوار هستند که می‌توان از مجذور آنها به عنوان شاخص‌های تصویر استفاده کرد.

الف) کمیت $\hat{\mu}_0$ ، میانگین h مشاهده‌ای است که درمیان ماتریس کواریانس آن مینیم خواهد بود.

ب) $\hat{\Sigma}_0$ ، ماتریس کواریانس مربوط به h مشاهده با احتساب ضرب در عامل سازگاری^{۱۱} (c_0) است. بنا به کروکس و دیگران (۱۹۹۹) در توزیع نرمال، $c_0 = \frac{\alpha}{F_{\chi^2_{p+2}}(\chi^2_{p,\alpha})}$ که در آن $\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{h(n)}{n}$

۳.۲ تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار تلفیقی

به منظور اُستوارسازی مؤلفه‌های اصلی که از ویژگی‌های مفید دو روش نامبرده برخوردار باشد، رویکرد تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار (ROBPCA) توسط هابرت و دیگران (۲۰۰۵) معرفی شد. این رویکرد از روش‌های PP برای کاهش بُعد اولیه متغیرها و از برخی ویژگی‌های برآوردهای MCD برای فضای داده با بُعد کمتر بهره می‌برد. در این رویکرد، با فرض این که n تعداد مشاهدات و p تعداد متغیرهای موجود در ماتریس داده X باشد، ابتدا فضای کلی داده‌ها با استفاده از تجزیه ویژه مقدار^{۱۵} (SVD) ماتریس داده به زیرفضای آفینی پدید آمده^{۱۶} توسط n مشاهده کاهش می‌یابد و مجموعه داده‌ها در زیرفضایی با بُعد حد اکثر $n - 1$ قرار می‌گیرند. سپس، ماتریس کواریانس اولیه Σ_h برای تعیین k مؤلفه اصلی و در نتیجه زیرفضای k بُعدی ساخته می‌شود. سرانجام، مجموعه نقاط داده بر روی زیرفضای مذکور که مکان و پراکنش آن به صورت اُستوار برآورد شده است، تصویر شده و k ویژه بردار $l_1, l_2, \dots, l_k$ به دست می‌آید. اکنون، ویژه بردارهای مربوط به این ویژه مقادیر، k مؤلفه اصلی اُستوار هستند.

خواننده علاقه‌مند به مطالعه جزئیات کامل و دقیق رویکرد ROBPCA و گام‌های اجرایی آن می‌تواند به هابرت و دیگران (۲۰۰۵) مراجعه کند.

۲.۲ اُستوارسازی مؤلفه‌های اصلی بر اساس جستجوی تصویر

علی‌رغم کارایی مناسب رویکرد PCA بر مبنای ماتریس کواریانس اُستوار، این روش دارای اشکالاتی است که هابرت و دیگران (۲۰۰۵) به آنها اشاره کردند. مشکل نخست، به دست آوردن ماتریس کواریانس اُستوار در داده‌های با بُعد بالا به دلیل محاسبات پیچیده آن است. مشکل دیگر این است که در برخی از مسائل، اندازه نمونه از تعداد متغیرها کمتر است ($n < p$). در این حالت، محاسبه برآوردهای MCD ممکن نیست چرا که این برآوردها در صورتی محاسبه می‌شود که تعداد متغیرهای موجود از h مشاهده، که در واقع اندازه زیرنمونه در رابطه (۱) است، کوچک‌تر باشد یعنی $p < h$. واضح است که در غیر این صورت ($p > h$)، درمیان ماتریس کواریانس هر h زیرنمونه به دلیل رتبه کامل نبودن برابر صفر خواهد بود.

برای رفع مشکلات مذکور، می‌توان از ایده هابر (۱۹۸۵) که رویکردی تحت عنوان جستجوی تصویر^{۱۲} (PP) پیشنهاد داد، استفاده کرد. هدف اصلی روش‌های PP ارائه تصاویری با بُعد کم از مجموعه نقاطی با بُعد بالا به وسیله ماکسیم‌سازی عددی تابع هدفی مشخص است که به این تابع هدف، شاخص تصویر^{۱۳} می‌گویند. در واقع، داده‌ها بر روی زیرفضایی با بُعد پایین تصویر می‌شوند به گونه‌ای که مقدار اُستواری پراکنش داده‌های تصویر

^{۱۱} Consistency factor

^{۱۲} Projection pursuit

^{۱۳} Projection index

^{۱۴} Median absolute deviation

^{۱۵} Singular-value decomposition

^{۱۶} Affine subspace spanned

متوالی واریانس مؤلفه‌های اصلی تحت قید اضافی $\sum_{j=1}^p |a_{kj}| \leq t$ با توجه به پارامتر تنظیم‌کننده t صورت می‌گیرد که a_{kj} نشان‌دهنده j امین عنصر از k امین بردار a است.

۲.۳ تعبیرپذیری مؤلفه‌های اصلی اُستوار

وجود نقاط دورافتاده و پیچیده بودن تفاسیر مؤلفه‌های اصلی به‌طور هم‌زمان سبب شد که محققان درصدد ارائه رویکردهای مناسب برای رفع چنین مشکلی باشند. در ابتدا، کروکس و دیگران (۲۰۱۳) با استفاده از ادغام قواعد تنکی به ساختار روش‌های PP توانستند رویکرد ترکیبی SRPCA را ارائه کنند. اما از آن‌جا که شناسایی نقاط دورافتاده در مسائل چندمتغیره از اهمیت بالایی برخوردار است، محققان رویکرد جدیدی ارائه کردند. در واقع بر خلاف دیدگاه، SRPCA هابرت و دیگران (۲۰۱۶) رویکردی کارآمد و مفید تحت عنوان ROSPCA پیشنهاد دادند که از ویژگی‌های رویکرد ROBPCA کمک می‌گیرد.

به‌طور کلی، ایده اصلی رویکرد ROSPCA مبتنی بر اجرای جداگانه کشف نقاط دورافتاده و تنک‌سازی مؤلفه‌ها است اما نتیجه نهایی کار به طریقی، هدف مشترک مقابله با نقاط دورافتاده و تعبیرپذیری مناسب مؤلفه‌ها را تأمین می‌کند. می‌توان گفت که از دیدگاه محاسباتی، این رویکرد در ابتدا همانند روش اُستوارسازی ROBPCA به شناسایی نقاط دورافتاده در مجموعه داده‌ها پرداخته و سپس با پیروی از رویکرد SCoTLASS مبتنی بر الگوریتم تور، تنک‌سازی مؤلفه‌ها را به مرحله اجرا در می‌آورد. با اجرای دو مرحله مورد اشاره، شخص با ماتریس کواریانسی روبرو می‌شود که ویژه بردارهای آن به‌درستی تغییرات بین داده‌های مورد مطالعه را توصیف می‌کنند. به بیانی دیگر، ویژه بردارهای حاصل در مقابل نقاط دورافتاده اُستوار بوده و در عین حال تعبیر مناسبی برای مؤلفه‌های اصلی ارائه

۳ تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار و تنک

یکی از جنبه‌های مشکل مجموعه توابع خطی در رویکردهای چندمتغیره مانند، PCA تعبیر و تفسیر آنها است. لذا، برای حل این مشکل و به دست آوردن مؤلفه‌های تعبیرپذیر، رویکردهای تنک متفاوتی پیشنهاد شده‌اند که در این بخش به توصیف مختصری از رویکرد تحلیل مؤلفه اصلی ساده‌سازی شده بر مبنای روش کمترین انقباض مطلق و عملگر انتخاب^{۱۷} (SCoTLASS) پرداخته می‌شود (جولیفه و دیگران، ۲۰۰۳). سپس، برای حصول مؤلفه‌هایی که ویژگی اُستواری و تنکی را به‌صورت توأم به همراه دارند، رویکرد ROSPCA تشریح می‌شود.

۱.۳ تنک‌سازی مؤلفه‌های اصلی مبتنی بر LASSO

به سبب وجود تعداد زیاد متغیرهای پیشگو^{۱۸} در معادلات رگرسیونی چندگانه و مشکلات ناشی از آن، تیشیرانی (۱۹۹۶) برای رفع مشکل تفسیر چنین معادلاتی، مطالعه‌های گسترده‌ای انجام داد و توانست ابزار مفیدی پیشنهاد کند. این رویکرد ارائه شده که توافقی میان انتخاب متغیر^{۱۹} و برآوردگرهای انقباضی^{۲۰} است، تحت عنوان "کمترین انقباض مطلق و عملگر انتخاب"^{۲۱} (LASSO) معرفی شد.

جولیفه و دیگران (۲۰۰۳) نیز به‌منظور تسهیل تفاسیر مؤلفه‌های اصلی، رویکردی بر مبنای روشی رگرسیون‌گونه پیشنهاد کردند. در واقع، آنها بر این عقیده بودند که می‌توان رویکرد PCA را به‌صورت یک مسئله بهینه‌سازی ساختاربندی نمود، آنگاه با استفاده از ایجاد قید LASSO بر روی ضرایب آن، ماتریس بار تنک و در نتیجه مؤلفه‌های اصلی قابل تعبیری ایجاد کرد. شایان ذکر است که رویکرد SCoTLASS بر اساس ماکسیم‌سازی

^{۱۷} Simplified component technique-least absolute shrinkage and operator

^{۱۸} Predictor variables

^{۱۹} Variable selection

^{۲۰} Shrinkage estimators

^{۲۱} Least absolute shrinkage and selection operator

دقیق‌تر می‌توان گفت که به ازای هر مقدار λ ، رویکرد مورد نظر با احتساب مقدار پارامتر λ تنگی مفروض بر روی مجموعه داده مورد مطالعه اعمال و سپس معیار اطلاع^{۲۴} (IC) محاسبه می‌شود. سرانجام، مقدار بهینه λ مقداری است که به ازای آن، کمترین مقدار IC رابطه^{۲۵} (۲) حاصل شود.

۴ شبیه‌سازی آماری و تحلیل مثال واقعی

در این بخش، ابتدا با استفاده از انجام شبیه‌سازی به ارزیابی عملکرد رویکرد ROSPCA پرداخته و بر اساس معیارهایی از قبیل زاویه بین زیرفضاهای^{۲۵} و معیار میانگین کل صفرها^{۲۶} که مناسب ارزیابی روش‌های مرتبط با PCA هستند، رویکردهای مطرح شده با یکدیگر مقایسه می‌شوند. سپس در ادامه، نحوه کاربست رویکرد ROSPCA در یک مثال واقعی تشریح می‌شود. گفتنی است که در این مقاله، انجام شبیه‌سازی و محاسبات آن با بسته آماری rospca (رینکینز، ۲۰۱۸) در نرم‌افزار R قابل انجام است.

۱.۴ بررسی شبیه‌سازی

به منظور ارزیابی رویکرد ROSPCA و مقایسه آن با رویکردهای CPCA، SCOTLASS، ROBPCA و SRPCA مطالعاتی شبیه‌سازی بر روی داده‌های عاری از نقاط دورافتاده^{۲۷} و داده‌های آلوده شده^{۲۸} انجام می‌شود. یکی از معیارهای مناسب برای تحقق این امر، استفاده از مقدار زاویه‌ای است که کرانوسکی (۱۹۷۹) به صورت زیر تعریف کرده است:

فرض کنید زیرفضای پدید آمده توسط k ویژه بردار نخست

می‌کنند. جزئیات بیشتر و کامل‌تری از گام‌های موجود برای اجرای رویکرد ROSPCA در هابرت و دیگران (۲۰۱۶) موجود است.

قابل ذکر است که رویکرد ROSPCA شامل دو ابر پارامتر^{۲۲} به صورت α و λ است که این مقادیر به ترتیب درجه استواری و میزان پارامتر تنگی داده‌ها را تعیین می‌کنند. گفتنی است که مقدار α ، کران پایینی بر روی تعدادی از مشاهدات منظم ایجاد می‌کند و این موضوع بدان معناست که با تعیین مقدار آن، حد اکثر $100(1-\alpha)\%$ از n مشاهده می‌توانند به عنوان نقاط دورافتاده در نظر گرفته شوند. به علاوه، بنا به هابرت و دیگران (۲۰۱۶)، مقدار λ بر اساس مینیمم‌سازی گونه‌ای از معیار اطلاع بیزی که مبتنی بر مجموع توان‌های دوم مانده‌ها است، انتخاب می‌شود. این معیار به صورت

$$BIC(\lambda) = \ln\left(\frac{1}{h_1 p} \sum_{i=1}^{h_1} OD_{(i)}^*(\lambda)\right) + df(\lambda) \frac{\ln(h_1 p)}{h_1 p}, \quad (2)$$

تعریف می‌شود که در آن h_1 اندازه مجموعه H_1 ظاهر شده در الگوریتم، ROSPCA p تعداد متغیرهای موجود، $OD_{(i)}(\lambda)$ کوچک‌ترین فاصله متعامد^{۲۹} i ام مدل در حضور پارامتر تنگی (λ) و $df(\lambda)$ تعداد بارهای غیر صفر زمانی که λ به عنوان پارامتر تنگی استفاده شده است، هستند. با توجه به رابطه^{۲۵} (۲) می‌توان دریافت که بخش نخست آن، میزان دقت و کیفیت برازش مدل را اندازه‌گیری می‌کند در حالی که بخش دوم، نشانگر توانایی برای پیچیدگی مدل است و سبب تعاملی میان درستی و تنگی مدل می‌شود. در عمل، مقدار λ به وسیله مینیمم‌سازی معیار مذکور روی بازه $[\lambda_{\max}, 0]$ انتخاب می‌شود که $\lambda_{\max}$ معرف تنگی کامل (دقیقاً یک بار غیر صفر در هر مؤلفه) است. برای تحقق این امر، مقدار بهینه λ برای رویکرد مربوط به وسیله بررسی تور هم‌فاصله^{۲۳} مقادیر λ روی این بازه انتخاب می‌شود. به عبارت

^{۲۲} Hyperparameter

^{۲۳} Equidistant grid

^{۲۴} Information criterion

^{۲۵} The angle between subspaces

^{۲۶} The average of total zero measure

^{۲۷} Outliers-free data

^{۲۸} Contaminated data

متغیرهای گروه های $1, 2, \dots, k$ به ترتیب برابر $a_1, a_2, \dots, a_k$ در نظر گرفته می شوند. شایان ذکر است که گروه $(k+1)$ ام این ماتریس شامل $p - (k \times b)$ متغیر باقی مانده است و متغیرهای آن ناهمبسته فرض می شوند ($a_{k+1} = 0$). حال، ویژه بردار تئک i ام این ماتریس برای $i = 1, 2, \dots, k$ به گونه ای حاصل می شود که از عضو $(b \times (i-1) + 1)$ ام تا عضو $(b \times i)$ ام آن مقدار $(-\frac{1}{\sqrt{b}})$ و بقیه عناصر، مقدار صفر را اختیار می کنند. به طور دقیق تر، هنگامی که نامساوی $a_1 > a_2 > \dots > a_k$ برقرار باشد، k ویژه بردار تئک ماتریس همبستگی مذکور به ترتیب برابر $p_1 = -\frac{1}{\sqrt{b}}q_1, p_2 = -\frac{1}{\sqrt{b}}q_2, \dots, p_k = -\frac{1}{\sqrt{b}}q_k$ خواهند بود که در آن، $q_i \in R^p (i = 1, 2, \dots, k)$ برداری است که b عنصر i ام آن مقدار یک و بقیه اش صفر هستند. پس از تولید ماتریس همبستگی (R) ، این ماتریس با استفاده از تساوی $\Sigma = V^\dagger R V^\dagger$ به ماتریس کواریانس تبدیل می شود که V نشان دهنده ماتریس قطری شامل واریانس متغیرها است.

اکنون n مشاهده از توزیع نرمال p -متغیره با میانگین 0_p و ماتریس کواریانس Σ تولید می شود. همچنین برای ایجاد ساختار تئک در داده ها، عبارت های نوفه 31 که به صورت نرمال توزیع شده اند به هر یک از p متغیر اضافه می شود. بنا بر این، مجموعه داده ها به صورت $X = X_u + X_{noise}$ تولید می شوند که $X_u \sim N_p(0, \Sigma)$ و $X_{noise} \sim N_p(0, I_p)$. سرانجام، برای داشتن توجیه مناسب در استفاده از رویکردهای اُستوار، به طور تصادفی 100% از نقاط داده با نقاط دور افتاده جایگزین می شوند.

برای انجام شبیه سازی پیش رو، مجموعه ای با ده متغیر ($p = 10$) در نظر گرفته می شود. به علاوه، در تمامی مراحل شبیه سازی فرض می شود $k = 2, b = 4, a_1 = 0.9$ و $a_2 = 0.5$. بنا به مقادیر مفروض همبستگی، ویژه مقادیر ماتریس R به ترتیب نزولی برابر با $0.1, 0.1, 0.1, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 1, 1, 3.7$ خواهند بود. بنا بر این، دو ویژه بردار نخست ماتریس R به صورت $p_1 = (-\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, 0, 0, 0, 0, 0, 0)'$ و $p_2 =$

ماتریس Σ به وسیله $E_k = \text{Span}\{e_1, \dots, e_k\}$ تعریف شود که بردار e_j ستون j ام ماتریس $I_{p,k}$ است. در ماتریس نامبرده، p نشان دهنده تعداد متغیرها و k نشان دهنده تعداد مؤلفه های اصلی است. اکنون، بیشترین زاویه بین E_k و زیر فضای پدید آمده توسط ستون های ماتریس بار برآورد شده $(P_{p,k})$ یا به طور خلاصه (P) برای هر رویکرد از طریق رابطه

$$\max_{\text{sub}} = \arccos(\sqrt{\lambda_k})$$

محاسبه می شود که در آن، λ_k کوچک ترین ویژه مقدار ماتریس $I'_{k,p} P_{p,k} P'_{k,p} I_{p,k}$ است. گفتنی است که این معیار، مقداری بین 0 تا $\frac{\pi}{4}$ را اختیار می کند اما به منظور یکسان سازی نتایج، مقادیر زوایا بر $\frac{\pi}{4}$ تقسیم خواهد شد تا مقادیر نهایی، اعدادی بین 0 تا 1 به دست آیند. بدیهی است که هر چه مقادیر حاصل به صفر نزدیک تر باشند، نشان دهنده عملکرد مناسب رویکرد به کار رفته خواهد بود.

یکی از معیارهایی که به منظور مقایسه برآورد تئکی رویکردهای مطرح شده در این مقاله به کار گرفته می شود، معیار صفر بودن 29 است (هابرت و دیگران ۲۰۱۶). در واقع این معیار، ماتریس P را به منظور تشخیص درستی ساختار تئکی آن مد نظر قرار می دهد. معیار حاضر با توجه به هر عضو ماتریس P ، مقادیر صفر و یک را به صورت زیر اختیار می کند:

$$\text{مقدار برآورد شده و واقعی هر دو صفر یا هر دو غیر صفر باشند} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \text{در غیر این صورت}$$

آن گاه، به میانگین تعداد صفرها روی تمامی عناصر ماتریس بار برآورد شده P و تعداد تکرارهای شبیه سازی، معیار کل صفرها 30 می گویند.

در شبیه سازی پیش رو، ساختار ماتریس همبستگی برای تولید ماتریسی با ویژه بردارهای تئک نقش بسزایی دارد. از این رو، ماتریس همبستگی با $k+1$ گروه از متغیرها طراحی می شود به گونه ای که بین متغیرهای گروه های مختلف، همبستگی وجود نداشته باشد. هر کدام از k گروه نخست این ماتریس، شامل حد اقل ۴ متغیر ($b \geq 4$) هستند. همچنین، همبستگی میان

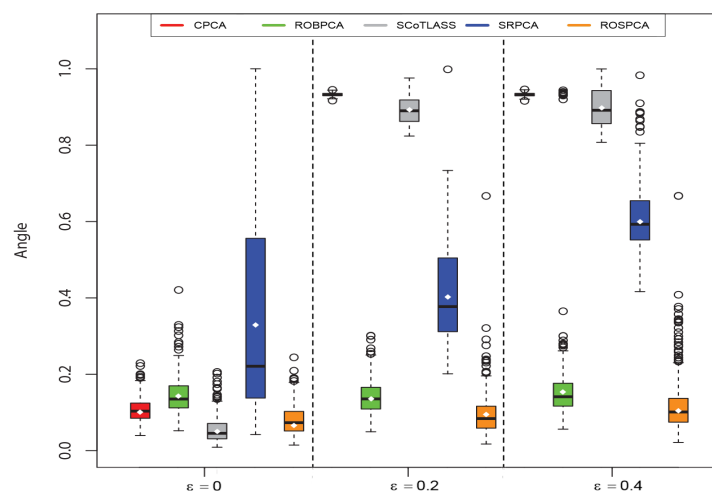
²⁹ Zero measure

³⁰ Total zero measure

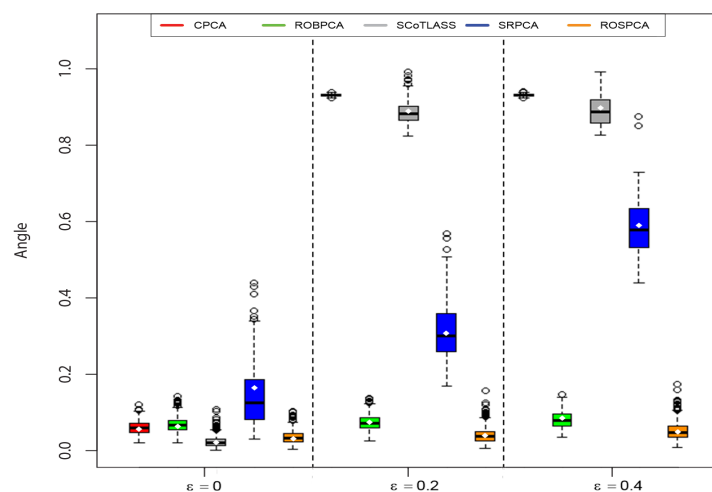
³¹ Noise terms

سرانجام، به منظور ارزیابی و مقایسه عملکرد رویکرد ROSPCA با سایر رویکردها، ۵۰۰ مجموعه داده طبق طرح شبیه سازی تشریح شده با نسبت های مختلف دورافتادگی ($\varepsilon = 0, 0.2, 0.4$) برای هر رویکرد تولید و معیارهای مطرح شده محاسبه می شوند. نتایج شبیه سازی به شرحی که در ادامه می آیند، هست. در ابتدا، نتایج حاصل از رویکردهای مطرح شده به صورت نمودارهای جعبه ای گزارش می شوند که این نمودارها بر مبنای بیشترین مقدار زاویه به دست آمده از هر رویکرد هستند.

اکنون برای تولید ماتریس کواریانس، ماتریس قطری V به صورت $V = \text{diag}\{100, 100, 100, 100, 25, 25, 25, 25, 4, 4\}$ در نظر گرفته می شود که نشان دهنده برابری واریانس های متغیرهای هر گروه است. در نهایت، برای حصول مقدار بهینه پارامتر تنگی در رویکردهای ROSPCA، SCoTLASS SRPCA و مقادیر λ یکی از مقادیر $\{0, 0.02, \dots, 2/48, 2/5\}$ فرض می شوند. شایان ذکر است که پارامتر α برای رویکردهای ROBPCA و ROSPCA برابر ۰/۵ در نظر گرفته می شود.



(الف)



(ب)

شکل ۱. مقادیر زاویه به دست آمده از رویکردهای ROSPCA و SCoTLASS SRPCA، ROBPCA، CPCA به ازای $p = 10$ و

$\varepsilon = 0, 0.2, 0.4$ برای (الف) $n = 100$ و (ب) $n = 300$.

جدول ۱. میانگین کل صفرهای حاصل از رویکردهای، CPCA، ROBPCA، SCoTLASS و SRPCA به ازای $p = 10$ و مقادیر

مقاوت n و ε						
$n = 100$			$n = 300$			
$\varepsilon = 0$	$\varepsilon = 0.2$	$\varepsilon = 0.4$	$\varepsilon = 0$	$\varepsilon = 0.2$	$\varepsilon = 0.4$	
0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	CPCA
0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4	ROBPCA
0.96	0.36	0.39	0.96	0.39	0.38	SCoTLASS
0.71	0.5	0.43	0.69	0.46	0.42	SRPCA
0.91	0.89	0.87	0.95	0.91	0.87	ROSPCA

مجموعه داده‌ها عاری از نقاط دورافتاده ($\varepsilon = 0$) باشند، به خوبی ماتریس بار تُنک P را برآورد می‌کند در حالی که با افزایش نرخ آلودگی، تُنکی ماتریس بار به خوبی تضمین نمی‌شود. همچنین، میانگین کل صفرهای مربوط به رویکرد SRPCA نشان می‌دهد که این روش عملکرد ضعیف‌تری نسبت به سایر رویکردها دارد. با مشاهده نتایج رویکرد ROSPCA مشخص است که این روش ترکیبی به درستی ساختار تُنک ماتریس P را در تمامی حالات حفظ می‌کند. به بیانی دیگر، رویکرد ROSPCA حتی با وجود تعداد زیادی نقاط دورافتاده در مجموعه داده‌ها، ماتریس بار تُنک P را به خوبی برآورد می‌کند. قابل ذکر است که رویکردهای CPCA و ROBPCA با توجه به ماهیت اصلی خود به سختی بارهای صفر تولید می‌کنند. لذا، میانگین کل صفرهای آنها به طور ثابت برابر مقدار 0.4% که درصدی از مقادیر ورودی غیر صفر در ماتریس P است، خواهد بود.

نتیجه کلی حاصل از انجام شبیه‌سازی نشان می‌دهد که رویکرد ROSPCA نه تنها برآوردهای اُستواری ارائه می‌کند بلکه به‌منظور شناسایی ساختار تنگ داده‌ها از سایر رویکردهای PCA کارایی به مراتب بهتری دارد.

٢.٤ تحليل مثال واقعي

برای پیاده‌سازی رویکرد، ROSPCA داده‌های جرم و جنایت مربوط به ایالت‌های آمریکا که در سال ۱۹۸۶ گزارش شده است، تحلیل می‌شود. این مجموعه داده در پی تحقیق به‌منظور بررسی نرخ انواع متفاوت جرم و جنایت بر حسب ۱۰۰۰۰۰ نفر ساکنین ۵۰ ایالت آمریکا گردآوری شده است (اوریت و هاترن، ۲۰۱۱). در این مجموعه داده، ۷ نوع متفاوت از جرائم شامل دو

با نگاهی به شکل ۱ مشاهده می‌شود که با افزایش تعداد مشاهدات نمونه (n)، آریبی برآوردها و پراکندگی مقادیر زاویه کاهش یافته‌اند. نمودارهای جعبه‌ای رویکرد CPCA نشان می‌دهند که این روش در داده‌های عاری از نقاط دورافتاده ($\varepsilon = 0$) همانند رویکردهای SCoTLASS و ROSPCA مدل مناسبی است. اما در صورت اعمال آلودگی ($\varepsilon = 0.2, 0.4$) و حضور نقاط دورافتاده، مقادیر زاویه متناظر با آن افزایش پیدا می‌کنند. نمودارهای رویکرد ROBPCA نیز در دو حالت n نشان می‌دهند که با افزایش نرخ آلودگی، مقادیر زاویه مقداری افزایش می‌یابند. به عبارتی، این رویکرد نسبت به رویکردهای CPCA SCoTLASS و SRPCA در حضور نقاط دورافتاده عملکرد بهتری دارد اما برای شناسایی ساختار تُنک داده‌ها مناسب نیست. گفتنی است که برای حالت $\varepsilon = 0$ ، بهترین نتیجه ممکن مربوط به رویکرد SCoTLASS است. اما این رویکرد نیز با حضور نقاط دورافتاده عملکرد ضعیفی از خود نشان می‌دهد. رویکرد ترکیبی SRPCA نیز بر خلاف رویکرد ROSPCA در حالت‌های مختلف n و نرخ‌های آلودگی، مقادیر زاویه نسبتاً بزرگی را تولید می‌کند و از آریبی بالایی نیز برخوردار است. اما ملاحظه می‌شود که رویکرد جدید ROSPCA در تمامی حالات n و سطوح آلودگی حتی زمانی که $\varepsilon = 0.4$ ، آریبی کمتری را از خود نشان می‌دهد. به علاوه، می‌توان گفت که در حضور و یا عدم حضور نقاط دورافتاده، رویکرد ROSPCA عملکرد بهتری نسبت به سایر رویکردهای منتسب به PCA دارد.

اکنون صحت تنگی رویکردهای مذکور با استفاده از معیار صفر بودن بررسی می‌شود. با نگاهی به جدول ۱ می‌توان گفت که رویکرد SCoTLASS در حالات مختلف n زمانی که

شکل ۴، نمودار تشخیصی مربوط به داده‌های جرم و جنایت در ایالت‌های آمریکا را پس از اعمال رویکرد ROSPCA نشان می‌دهد. با توجه به این شکل مشاهده می‌شود که گروهی از مشاهدات، مقادیر OD بالاتری از خط برش دارند که تحت عنوان نقاط دورافتاده یاد می‌شوند. لذا، می‌توان دریافت که رویکرد نامبرده می‌تواند نقاط دورافتاده موجود در مجموعه داده‌ها را به درستی کشف و شناسایی کند.

علاوه بر این، نمودار مقادیر بارهای حاصل از کاربست رویکرد ROSPCA بر روی مجموعه داده تحت بررسی در شکل ۵ نشان داده شده است. با توجه به این شکل، مشاهده می‌شود که تمامی بارهای مؤلفه اصلی نخست، غیر صفر هستند. به عبارت دیگر، به نظر می‌رسد که تمامی متغیرهای موجود در آن تقریباً به یک میزان نقش ایفا می‌کنند و نمی‌توان نقش متغیری را نسبت به سایر متغیرها بیشتر یا کمتر دانست. همچنین، با نگاهی به مقادیر بارهای مؤلفه اصلی دوم نیز مشخص است که بارهای مربوط به متغیرهای X_2 و X_4 صفر بوده و پنج متغیر دیگر دارای ضرایبی غیر صفر هستند. در مؤلفه اصلی سوم نیز، متغیرهای X_2 ، X_5 و X_6 دارای بارهای صفر بوده و چهار متغیر باقی‌مانده شامل بارهای غیر صفر هستند. بنا بر این ملاحظه می‌شود که تُنکی رویکرد ROSPCA در این مسئله به خوبی لحاظ شده است.

نتایج حاصل از اعمال رویکرد ROSPCA بر روی مجموعه داده جرم و جنایت نشان داد که این ابزار توانست علاوه بر کاهش بُعد و توصیف منابع اصلی تغییرات موجود در ماهیت داده‌ها که از اهداف اصلی رویکردهای متفاوت PCA است، به درستی نقاط دورافتاده موجود در داده‌ها را کشف و ساختار تُنک مناسبی ارائه کند.

بحث و نتیجه‌گیری

در مقاله حاضر، چند دیدگاه متفاوت غلبه بر مشکلات رویکرد PCA معمولی مد نظر قرار گرفت. به طور دقیق‌تر، رویکردهای تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار برای حل مشکلات ناشی از

گروه جرائم خشونت‌آمیز (صدمات به اشخاص) و جرائم اموالی (صدمات به منازل مسکونی) ثبت شده است. قابل ذکر است که جرائم خشونت‌آمیز شامل قتل و کشتار ($X_1 = \text{Murder}$)، تجاوز به عنف ($X_2 = \text{Rape}$)، سرقت ($X_3 = \text{Robbery}$) و یورش ($X_4 = \text{Assault}$) و جرائم اموالی شامل ورود غیر قانونی به خانه و دزدی از آن ($X_5 = \text{Burglary}$)، دستبرد به اموال شخصی دیگران ($X_6 = \text{Theft}$) و سرقت وسایل نقلیه موتوری ($X_7 = \text{Vehicle}$) هستند.

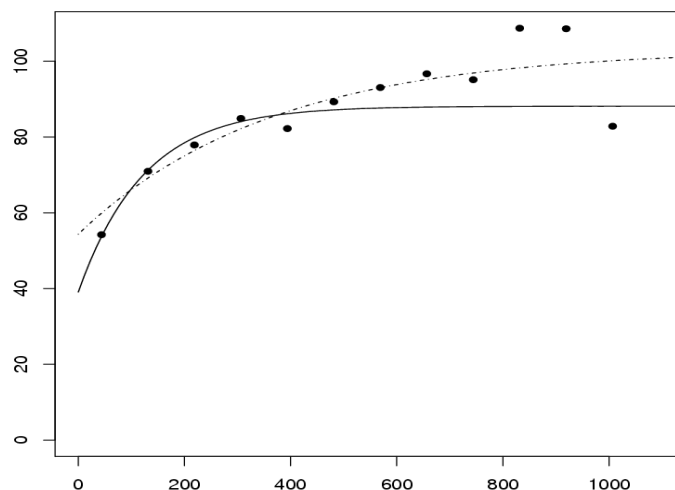
از آن‌جا که برآوردگر MCD در مقابل نقاط دورافتاده اُستوار است، فاصله ماهالانوبیس مبتنی بر آن می‌تواند یکی از معیارهای مناسب برای تشخیص دقیق چنین نقاطی باشد (هابرت و دی بروین، ۲۰۱۰). شکل ۲، نمودار ریشه توان دوم فاصله اُستوار بر حسب ایالت‌های آمریکا است که در آن، نقاط موجود در بالای خط برش (خط آستانه) نشان‌دهنده نقاط دورافتاده هستند. لذا در این حالت، استفاده از رویکرد PCA به منظور کشف منابع اصلی تغییرات نتایجی غیر معتبر به همراه خواهد داشت. از این رو، استفاده از رویکردهای اُستوار مطرح شده برای اخذ نتایج مورد اعتماد، مفید فایده خواهد بود. اما از آن‌جا که حصول مؤلفه‌های اصلی تعبیرپذیر نیز یکی از اهداف اصلی محقق است، پیاده‌سازی رویکرد ترکیبی اُستوار و تُنک ROSPCA بر روی داده‌های حاضر دنبال می‌شود.

با توجه به جدول ۲ که نشان‌دهنده درصد واریانس تجمعی مؤلفه‌های اصلی است، می‌توان تعداد مؤلفه‌های مؤثر در اجرای رویکرد را انتخاب کرد. اگر مبنای بیان واریانس تجمعی با حد اقل ۹۰٪ به عنوان حد اقل مورد نیاز باشد، واضح است که تعداد سه مؤلفه اصلی ($k = 3$) برای به‌کارگیری رویکرد ROSPCA مناسب است.

برای تعیین مقدار بهینه λ ، مقادیر λ با فاصله ۰/۰۲ به صورت $\{0, 0/02, 0/04, \dots, 1/96, 1/98, 2\}$ در نظر گرفته شدند. شکل ۳، نمودار مقادیر رابطه (۲) بر حسب ۵۰ مقدار λ مفروض است که نشان می‌دهد به ازای $\lambda = 0/54$ ، معیار BIC کمترین مقدار خود ($-2/801$) را اختیار می‌کند. لذا، مقدار پارامتر تُنکی برابر ۰/۵۴ انتخاب می‌شود. اکنون با توجه به مقادیر تعیین شده، رویکرد ROSPCA اجرا و نتایج آن بیان می‌شود.

پا به عرصه وجود بگذارد که هدف آن به دست آوردن مؤلفه‌های اصلی اُستوار با مقادیر بار تنگ بود. نتایج بررسی و ارزیابی شبیه‌سازی نیز نشان داد که رویکرد ROSPCA به مراتب عملکرد بهتری نسبت به سایر رویکردهای متفاوت PCA دارد.

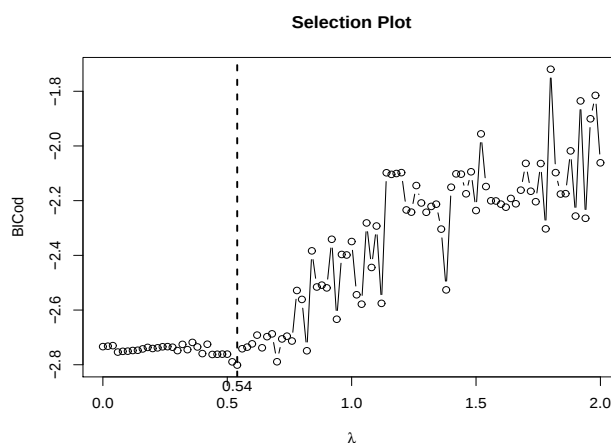
حضور نقاط دورافتاده و رویکردهای تنگ‌سازی به‌منظور افزایش تعبیرپذیری از جمله روش‌های مفید هستند که مورد بحث قرار گرفت. وجود این دو مشکل به‌صورت هم‌زمان در بسیاری از مسائل آمار کاربردی باعث شد، رویکرد جدیدی برای تحلیل مؤلفه‌های اصلی اُستوار و تنگ تحت عنوان رویکرد ROSPCA



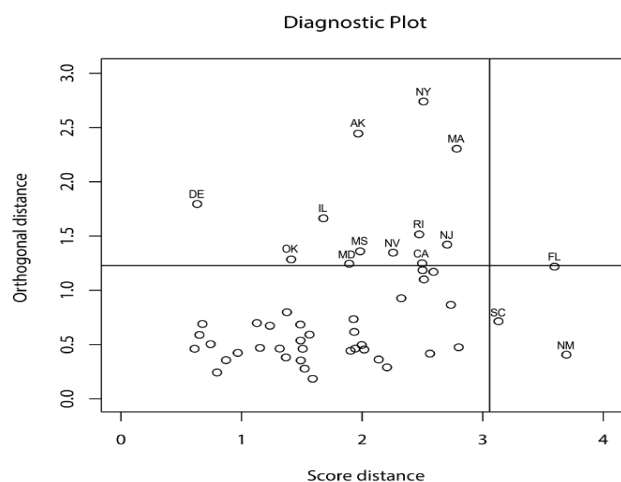
شکل ۲. نمودار ریشه توان دوم فاصله اُستوار بر حسب ایالت‌های آمریکا

جدول ۲. تغییرات تجمعی مؤلفه‌های اصلی (به درصد)

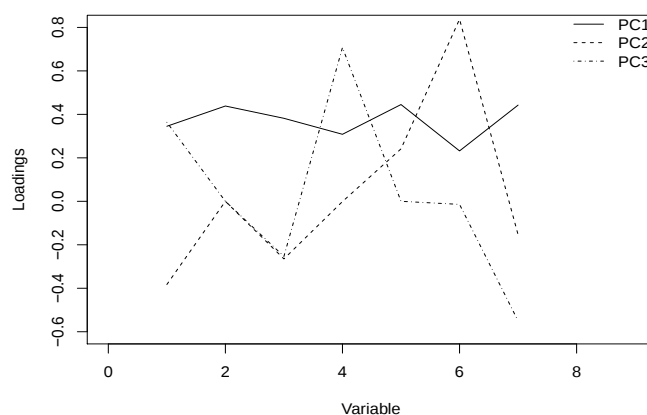
PC1	PC2	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7
۶۹/۶	۸۸/۵	۹۵/۰	۹۷/۰۷	۹۸/۵۳	۹۹/۶۶	۱۰۰



شکل ۳. نمودار مقادیر معیار IC بر حسب مقادیر مفروض ۰.۸ نمودار ریشه توان دوم فاصله اُستوار بر حسب ایالت‌های آمریکا



شکل ۴. نمودار تشخیصی مربوط به رویکرد ROSPCA ($k=3$ ، $\alpha=0.5$ و $\lambda=0.54$).



شکل ۵. نمودار مقادیر بار حاصل از رویکرد ROSPCA ($k=3$ ، $\lambda=0.54$ و $\alpha=0.5$).

مراجع

- [1] Croux, C., Filzmoser, P. and Fritz, H. (2013). Robust Sparse Principal Component Analysis. *Technometrics*, **55**, 202-214.
- [2] Croux, C., and Haesbroeck, G. (1999). Influence Function and Efficiency of the Minimum Covariance Determinant Scatter Matrix Estimator. *Journal of Multivariate Analysis*, **71**, 161-190.
- [3] Everitt, B., and Hothorn, T. (2011). *An Introduction to Applied Multivariate Analysis with R*, Springer, New York.
- [4] Huber, P. J. (1985). Projection Pursuit. *The Annals of Statistics*, **13**, 435-475.

- [5] Hubert, M., and Debruyne, M. (2010). Minimum Covariance Determinant. *Computational Statistics*, **2**, 36-43.
- [6] Hubert, M., Reynkens, T., Schmitt, E., and Verdonck, T. (2016). Sparse PCA for High-Dimensional Data with Outliers. *Technometrics*, **58**, 424-434.
- [7] Hubert, M., Rousseeuw, P. J., and Vanden Branden, K. (2005). ROBPCA: A New Approach to Robust Principal Component Analysis. *Technometrics*, **47**, 64-79.
- [8] Jolliffe, I. (2002). *Principal Component Analysis*, 2nd Edition, Springer, New York.
- [9] Jolliffe, I. T., Trendafilov, N. T., and Uddin, M. (2003). A Modified Principal Component Technique Based on the LASSO. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **12**, 531-547.
- [10] Krzanowski, W. J. (1979). Between-Groups Comparison of Principal Components. *Journal of the American Statistical Association*, **74**, 703-707.
- [11] Rousseeuw, P. J. (1985). Multivariate Estimation with High Breakdown Point. *Mathematical Statistics and Applications*, **8**, 283-297.
- [12] Rousseeuw, P. J., and Driessen, K. V. (1999). A Fast Algorithm for the Minimum Covariance Determinant Estimator. *Technometrics*, **41**, 212-223.
- [13] Tibshirani, R. (1996). Regression Shrinkage and Selection via the Lasso. *Methodological*, **58**, 267-288.