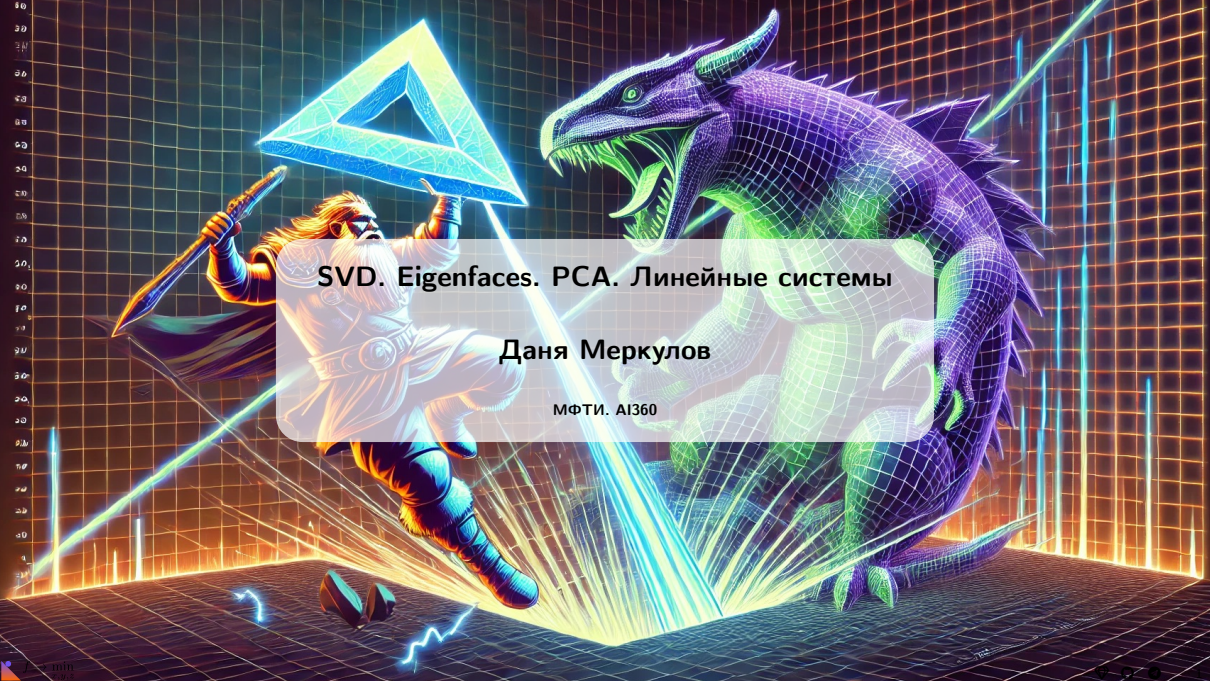


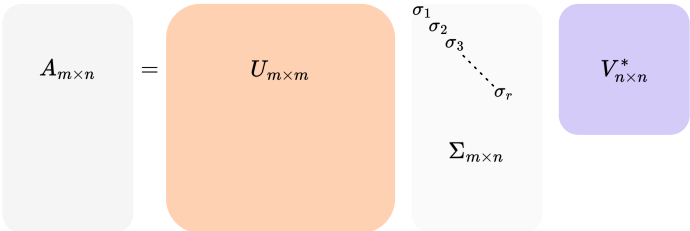
SVD. Eigenfaces. PCA. Линейные системы

Даня Меркулов

МФТИ. AI360

Сингулярное разложение матрицы

Сингулярное разложение матрицы



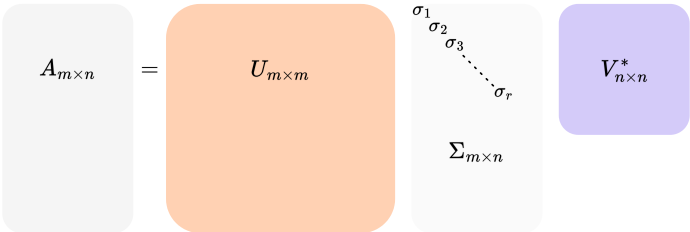
Для любой матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ существует разложение:

$$A = U\Sigma V^*,$$

где

- $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ - унитарная матрица левых сингулярных векторов

Сингулярное разложение матрицы



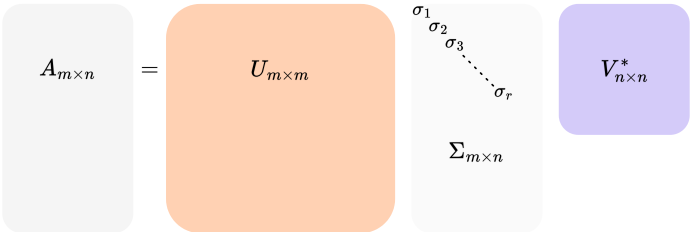
Для любой матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ существует разложение:

$$A = U\Sigma V^*,$$

где

- $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ - унитарная матрица левых сингулярных векторов
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ - диагональная матрица сингулярных чисел
  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$

Сингулярное разложение матрицы



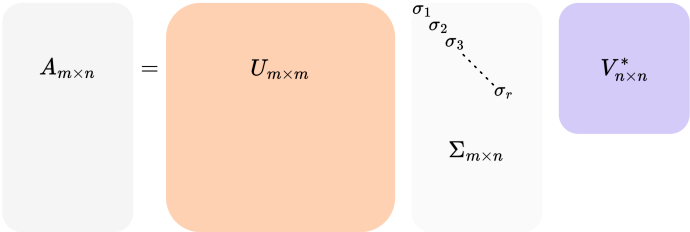
Для любой матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ существует разложение:

$$A = U\Sigma V^*,$$

где

- $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ - унитарная матрица левых сингулярных векторов
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ - диагональная матрица сингулярных чисел
  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$
- $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ - унитарная матрица правых сингулярных векторов

Сингулярное разложение матрицы



Для любой матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ существует разложение:

$$A = U\Sigma V^*,$$

где

- $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ - унитарная матрица левых сингулярных векторов
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ - диагональная матрица сингулярных чисел
  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$
- $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ - унитарная матрица правых сингулярных векторов
- Сингулярные числа единственны. Если все сингулярные числа различны, то разложение единственно с точностью до унитарной диагональной матрицы D: $U\Sigma V^* = UD\Sigma(VD)^* = U\Sigma V^*$.

Теорема Экарта-Янга

Наилучшее приближение низкого ранга может быть вычислено с помощью SVD.

Пусть $r < \text{rank}(A)$, $A_r = U_r \Sigma_r V_r^*$. Тогда

$$\min_{\text{rank}(B)=r} \|A - B\|_2 = \|A - A_r\|_2 = \sigma_{r+1}.$$

То же самое верно для $\|\cdot\|_F$, но $\|A - A_r\|_F = \sqrt{\sigma_{r+1}^2 + \cdots + \sigma_{\min(n,m)}^2}$.

Следствие: вычисление наилучшего приближения ранга r эквивалентно установке $\sigma_{r+1} = 0, \ldots, \sigma_K = 0$. Ошибка

$$\min_{A_r} \|A - A_r\|_2 = \sigma_{r+1}, \quad \min_{A_r} \|A - A_r\|_F = \sqrt{\sigma_{r+1}^2 + \cdots + \sigma_K^2}$$

вот почему важно смотреть на скорость убывания сингулярных значений.

Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Решение

1. Простейшая форма SVD выглядит так:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Решение

1. Простейшая форма SVD выглядит так:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

2. Однако, если вы хотите использовать полную форму с квадратными сингулярными матрицами:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-5}{\sqrt{42}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{4}{\sqrt{42}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{42}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{14} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Решение

1. Простейшая форма SVD выглядит так:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

2. Однако, если вы хотите использовать полную форму с квадратными сингулярными матрицами:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-5}{\sqrt{42}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{4}{\sqrt{42}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{42}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{14} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

3. Вычислим $A^T A$:

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = 1^2 + 2^2 + 3^2 = 14.$$

Сингулярные значения σ_i являются квадратными корнями из собственных значений $A^T A$. Поскольку $A^T A$ является 1×1 матрицей со значением 14, сингулярное значение равно $\sigma = \sqrt{14}$.

Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Решение

1. Простейшая форма SVD выглядит так:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} \end{bmatrix} \left[\sqrt{14}\right] [1]$$

2. Однако, если вы хотите использовать полную форму с квадратными сингулярными матрицами:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-5}{\sqrt{42}} \\ \frac{2}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{4}{\sqrt{42}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{42}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{14} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} [1]$$

3. Вычислим $A^T A$:

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = 1^2 + 2^2 + 3^2 = 14.$$

Сингулярные значения σ_i являются квадратными корнями из собственных значений $A^T A$. Поскольку $A^T A$ является 1×1 матрицей со значением 14, сингулярное значение равно $\sigma = \sqrt{14}$.

4. Поскольку V является $n \times n$ ортогональной матрицей (1×1 в этом случае), она может быть $V = [1]$ (или $V = [-1]$). Мы выбираем $V = [1]$.

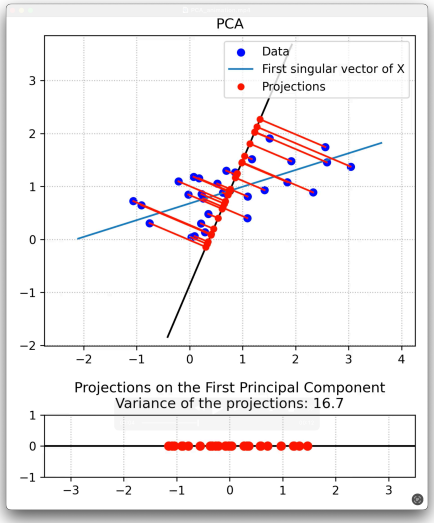
Пример 2

Решите упражнение Eigenfaces

Метод главных компонент

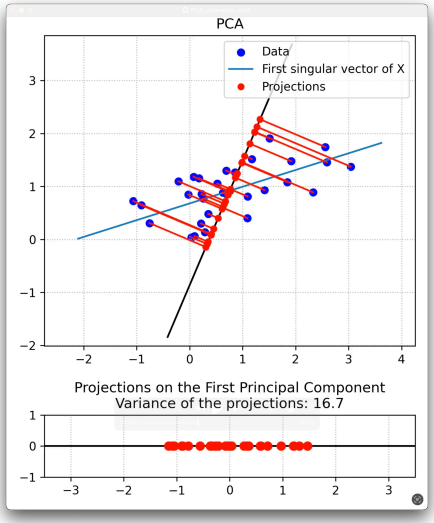
Общая идея уменьшения размерности

Метод главных компонент как задача оптимизации



Первая компонента должна быть определена так, чтобы максимизировать дисперсию (вариабельность) проекции. Предположим, что мы уже нормализовали данные, т.е. $\sum_i a_i = 0$, тогда дисперсия выборки станет суммой всех квадратов проекций точек данных на наш вектор $\mathbf{w}_{(1)}$, что приводит к следующей задаче оптимизации:

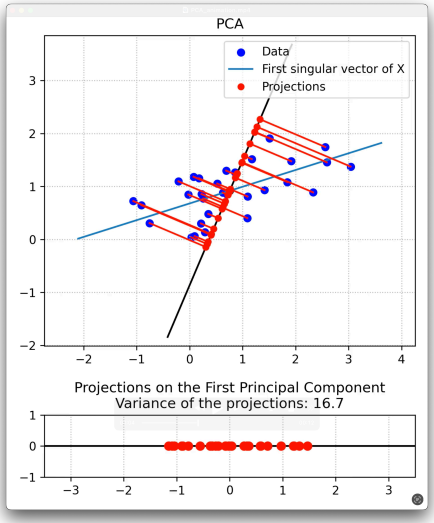
Метод главных компонент как задача оптимизации



Первая компонента должна быть определена так, чтобы максимизировать дисперсию (вариабельность) проекции. Предположим, что мы уже нормализовали данные, т.е. $\sum_i a_i = 0$, тогда дисперсия выборки станет суммой всех квадратов проекций точек данных на наш вектор $\mathbf{w}_{(1)}$, что приводит к следующей задаче оптимизации:

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \left\{ \sum_i \left(\mathbf{a}_{(i)}^\top \cdot \mathbf{w} \right)^2 \right\}$$

Метод главных компонент как задача оптимизации

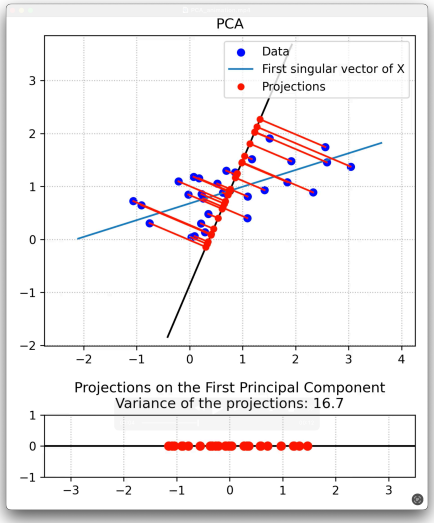


Первая компонента должна быть определена так, чтобы максимизировать дисперсию (вариабельность) проекции. Предположим, что мы уже нормализовали данные, т.е. $\sum_i a_i = 0$, тогда дисперсия выборки станет суммой всех квадратов проекций точек данных на наш вектор $\mathbf{w}_{(1)}$, что приводит к следующей задаче оптимизации:

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \left\{ \sum_i \left(\mathbf{a}_{(i)}^\top \cdot \mathbf{w} \right)^2 \right\}$$

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \{ \|\mathbf{A}\mathbf{w}\|^2 \} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \{ \mathbf{w}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{w} \}$$

Метод главных компонент как задача оптимизации



Первая компонента должна быть определена так, чтобы максимизировать дисперсию (вариабельность) проекции. Предположим, что мы уже нормализовали данные, т.е. $\sum_i a_i = 0$, тогда дисперсия выборки станет суммой всех квадратов проекций точек данных на наш вектор $\mathbf{w}_{(1)}$, что приводит к следующей задаче оптимизации:

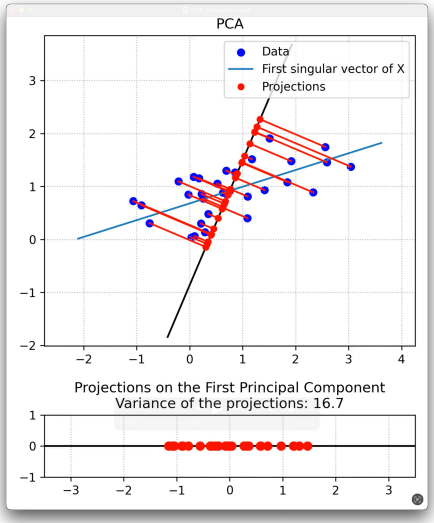
$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \left\{ \sum_i \left(\mathbf{a}_{(i)}^\top \cdot \mathbf{w} \right)^2 \right\}$$

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \{ \|\mathbf{A}\mathbf{w}\|^2 \} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \{ \mathbf{w}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{w} \}$$

так как мы ищем единичный вектор, мы можем переформулировать задачу:

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max \left\{ \frac{\mathbf{w}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{w}}{\mathbf{w}^\top \mathbf{w}} \right\}$$

Метод главных компонент как задача оптимизации



Первая компонента должна быть определена так, чтобы максимизировать дисперсию (вариабельность) проекции. Предположим, что мы уже нормализовали данные, т.е. $\sum_i a_i = 0$, тогда дисперсия выборки станет суммой всех квадратов проекций точек данных на наш вектор $\mathbf{w}_{(1)}$, что приводит к следующей задаче оптимизации:

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \left\{ \sum_i \left(\mathbf{a}_{(i)}^\top \cdot \mathbf{w} \right)^2 \right\}$$

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \{\|\mathbf{A}\mathbf{w}\|^2\} = \arg\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \{\mathbf{w}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{w}\}$$

так как мы ищем единичный вектор, мы можем переформулировать задачу:

$$\mathbf{w}_{(1)} = \arg\max \left\{ \frac{\mathbf{w}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{w}}{\mathbf{w}^\top \mathbf{w}} \right\}$$

Известно, что для положительно полуопределенной матрицы $A^\top A$ такой вектор это **собственный вектор** $A^\top A$, соответствующий наибольшему собственному значению.

Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\underset{n\times k}{\Pi} = \underset{n\times d}{A} \cdot \underset{d\times k}{W}$$

Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\underset{n\times k}{\Pi} = \underset{n\times d}{A} \cdot \underset{d\times k}{W}$$

описывает проекцию данных на k главных компонент, где W содержит первые (по величине собственных значений) k собственных векторов $A^\top A$.

Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\underset{n\times k}{\Pi} = \underset{n\times d}{A} \cdot \underset{d\times k}{W}$$

описывает проекцию данных на k главных компонент, где W содержит первые (по величине собственных значений) k собственных векторов $A^\top A$.

Теперь мы кратко выведем, как SVD может привести нас к PCA.

Сначала мы запишем SVD нашей матрицы:

$$A = U\Sigma W^\top$$

Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\underset{n\times k}{\Pi} = \underset{n\times d}{A} \cdot \underset{d\times k}{W}$$

описывает проекцию данных на k главных компонент, где W содержит первые (по величине собственных значений) k собственных векторов $A^\top A$.

Теперь мы кратко выведем, как SVD может привести нас к PCA.

Сначала мы запишем SVD нашей матрицы:

$$A = U\Sigma W^\top$$

и транспонируем его:

$$\begin{aligned} A^\top &= (U\Sigma W^\top)^\top \\ &= (W^\top)^\top \Sigma^\top U^\top \\ &= W\Sigma^\top U^\top \\ &= W\Sigma U^\top \end{aligned}$$

Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\underset{n\times k}{\Pi} = \underset{n\times d}{A} \cdot \underset{d\times k}{W}$$

описывает проекцию данных на k главных компонент, где W содержит первые (по величине собственных значений) k собственных векторов $A^\top A$.

Теперь мы кратко выведем, как SVD может привести нас к PCA.

Сначала мы запишем SVD нашей матрицы:

$$A = U\Sigma W^\top$$

и транспонируем его:

$$\begin{aligned} A^\top &= (U\Sigma W^\top)^\top \\ &= (W^\top)^\top \Sigma^\top U^\top \\ &= W\Sigma^\top U^\top \\ &= W\Sigma U^\top \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим матрицу $AA^\top$:

$$\begin{aligned} A^\top A &= (W\Sigma U^\top)(U\Sigma V^\top) \\ &= W\Sigma I\Sigma W^\top \\ &= W\Sigma\Sigma W^\top \\ &= W\Sigma^2 W^\top \end{aligned}$$

которая соответствует разложению матрицы $A^\top A$, где W - матрица собственных векторов $A^\top A$, а Σ^2 содержит собственные значения $A^\top A$.

Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\underset{n\times k}{\Pi} = \underset{n\times d}{A} \cdot \underset{d\times k}{W}$$

описывает проекцию данных на k главных компонент, где W содержит первые (по величине собственных значений) k собственных векторов $A^\top A$.

Теперь мы кратко выведем, как SVD может привести нас к PCA.

Сначала мы запишем SVD нашей матрицы:

$$A = U\Sigma W^\top$$

и транспонируем его:

$$\begin{aligned} A^\top &= (U\Sigma W^\top)^\top \\ &= (W^\top)^\top \Sigma^\top U^\top \\ &= W\Sigma^\top U^\top \\ &= W\Sigma U^\top \end{aligned}$$

Теперь рассмотрим матрицу $AA^\top$:

$$\begin{aligned} A^\top A &= (W\Sigma U^\top)(U\Sigma V^\top) \\ &= W\Sigma I\Sigma W^\top \\ &= W\Sigma\Sigma W^\top \\ &= W\Sigma^2 W^\top \end{aligned}$$

которая соответствует разложению матрицы $A^\top A$, где W - матрица собственных векторов $A^\top A$, а Σ^2 содержит собственные значения $A^\top A$.

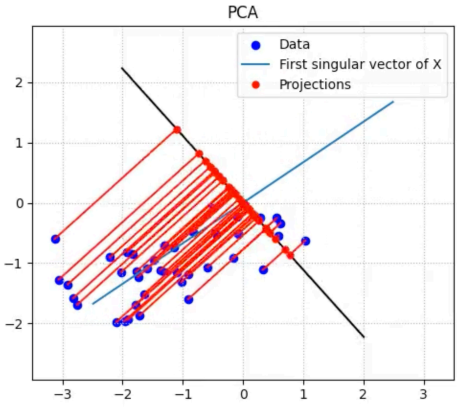
В итоге:

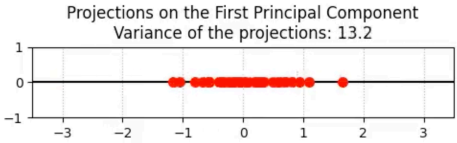
$$\begin{aligned} \Pi &= A \cdot W = \\ &= U\Sigma W^\top W = U\Sigma \end{aligned}$$

Последняя формула дает нам простой способ вычислить PCA через SVD с любым количеством главных компонент:

$$\Pi_r = U_r \Sigma_r$$

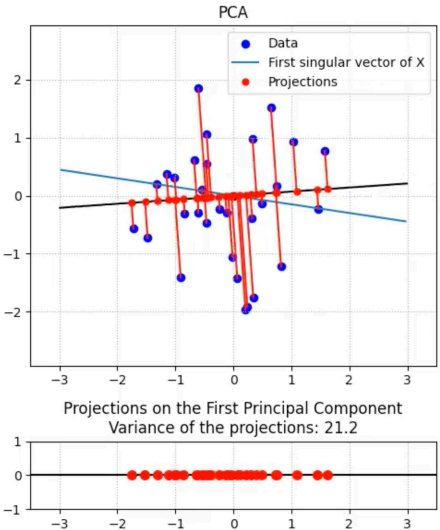
PCA. Упражнение 1





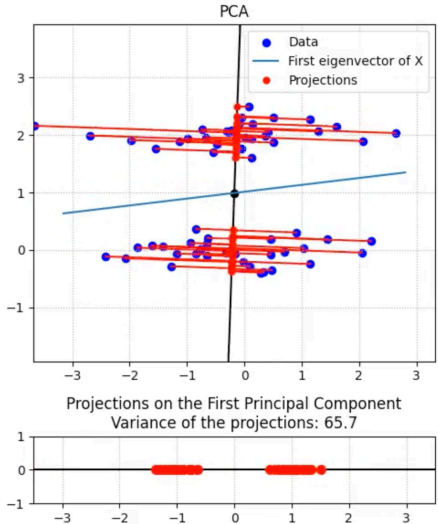
Что могло пойти не так с этим PCA?

PCA. Упражнение 2



Что могло пойти не так с этим PCA?

PCA. Упражнение 3

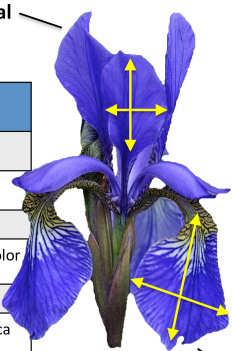


Что могло пойти не так с этим PCA?

Iris dataset variance

Samples
(instances, observations)

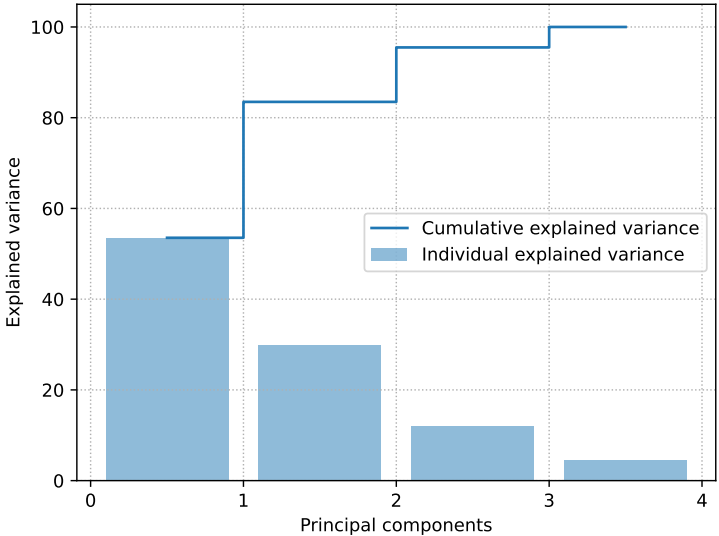
	Sepal length	Sepal width	Petal length	Petal width	Class label
1	5.1	3.5	1.4	0.2	Setosa
2	4.9	3.0	1.4	0.2	Setosa
...					
50	6.4	3.5	4.5	1.2	Versicolor
...					
150	5.9	3.0	5.0	1.8	Virginica



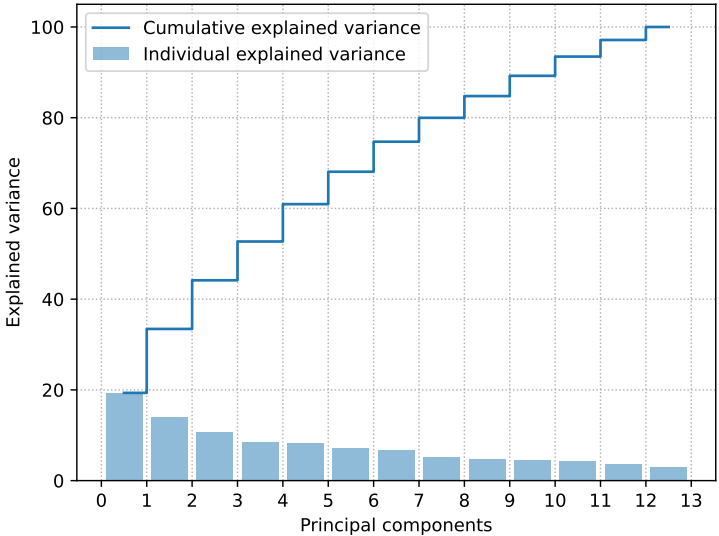
Features
(attributes, measurements, dimensions)

Class labels
(targets)

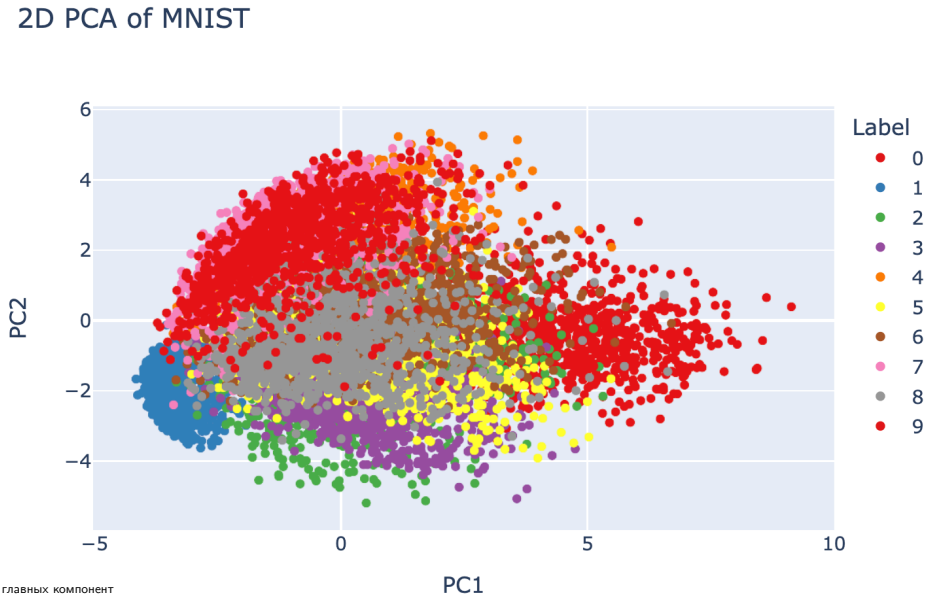
Iris dataset variance



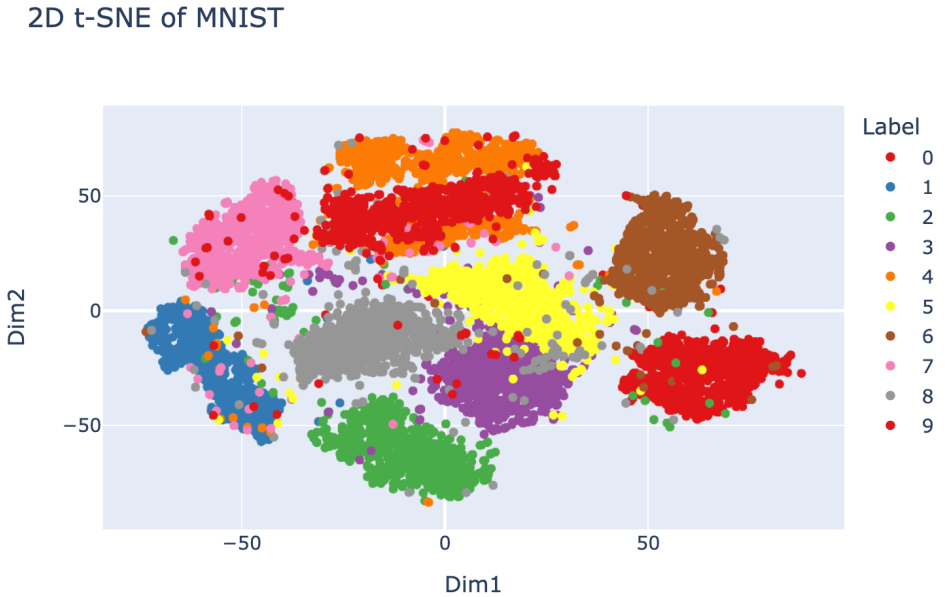
Wine dataset variance



PCA on MNIST



t-SNE on MNIST



UMAP on MNIST