海量高维数据与维度约减

七月在线 龙老师 2016年7月23日



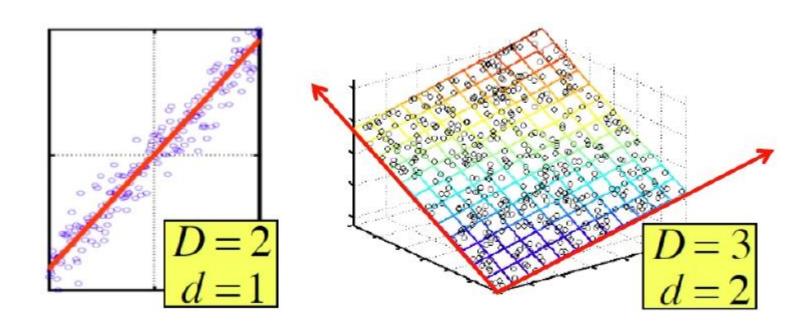
主要内容

- □为什么要数据降维
- □为什么能数据降维
- □ SVD
 - 基本概念与性质
 - 怎么用SVD降维
 - 实际案例
- ☐ CUR

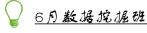
为什么要降维

- □ 海量数据太大,不得不降维。
- □可以让你使用简单的模型运算的更快,更容易理解,更容易维护。
- □优质的降维数据可以在使用不是最优的模型 参数的情况下得到不错的预测结果,这样你 就不必费力去选择最适合的模型和最优的参 数了。

为什么能降维



- □ 假设:数据实际上是存在或者靠近一个低维子空间中。
- □ 子空间的坐标轴能够最有效地表达这个数据



回忆:矩阵的秩

□矩阵的秩:矩阵的线性独立的列(行)的 个数。

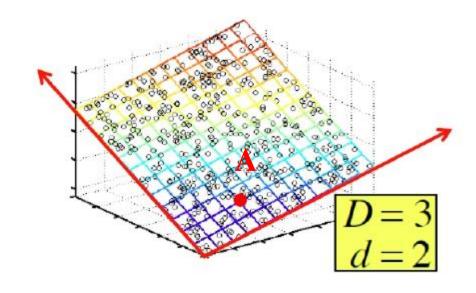
矩阵 A =
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -2 & -3 & 1 \\ 3 & 5 & 0 \end{bmatrix}$$
 的秩 r=2

- □ 为什么关心矩阵的秩?
 - 我们可以把A用两个新的基向量表示:
 - □ [1 2 1] [-2 -3 1]
 - 则相应的坐标就变为: [10] [01] [11]

秩其实就是最小的维度

- □ 观察三维视图:
 - 把矩阵的每一行作为一点在三维空间的坐标

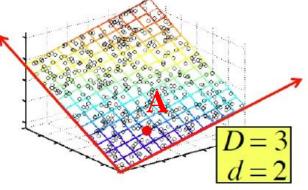
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -2 & -3 & 1 \\ 3 & 5 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{matrix}$$



秩其实就是最小的维度

- □ 我们可以重新采用一个坐标系,这个坐标系 是以原矩阵的前两行作为坐标基底的。
 - 老坐标基底: [100] [010] [001]
 - 新坐标基底:[121][-2-31]
- □则ABC三点的新坐标分别为:

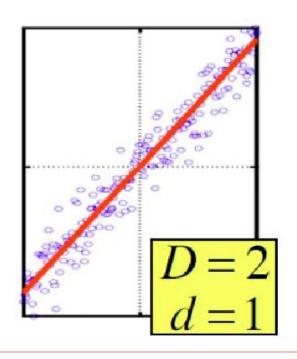
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -2 & -3 & 1 \\ 3 & 5 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{A} \mathbf{B} \mathbf{C}$$



□ 注意:我们已经把ABC三点降维了

降维的关键

- □ 降维的关键就是找到能够表达数据的最少维度,用最少的坐标轴表示数据。
 - 右图的点在二维空间中
 - 但大量聚集在红线附近
 - 所以就可以用红线所代表的 一维坐标来表示。
 - 当然这样做有一点误差



SVD

$A[m \times n] = U[m \times r] \sum_{[r \times r]} (V[n \times r]) \top$

A: 输入矩阵

m x n (e.g., m 篇文章, n 个词语)

U: 左奇异向量矩阵

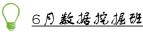
mxr(m篇文章,r个主题)

Σ: 奇异值矩阵

rxr对角阵(每个主题的重要性)(r:矩阵A的秩)

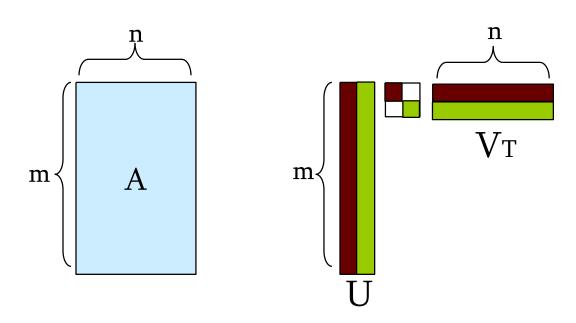
V:右奇异向量矩阵

nxr(n个词语,r个主题)



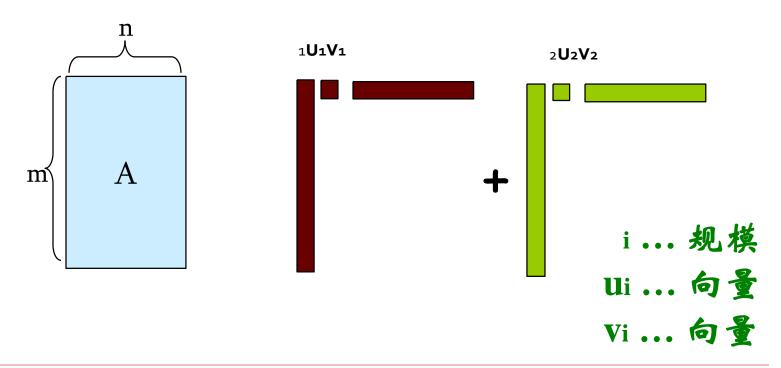
奇异值分解

$\mathbf{A} pprox \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T = \sum_i \sigma_i \mathbf{u}_i \circ \mathbf{v}_i^{\mathsf{T}}$



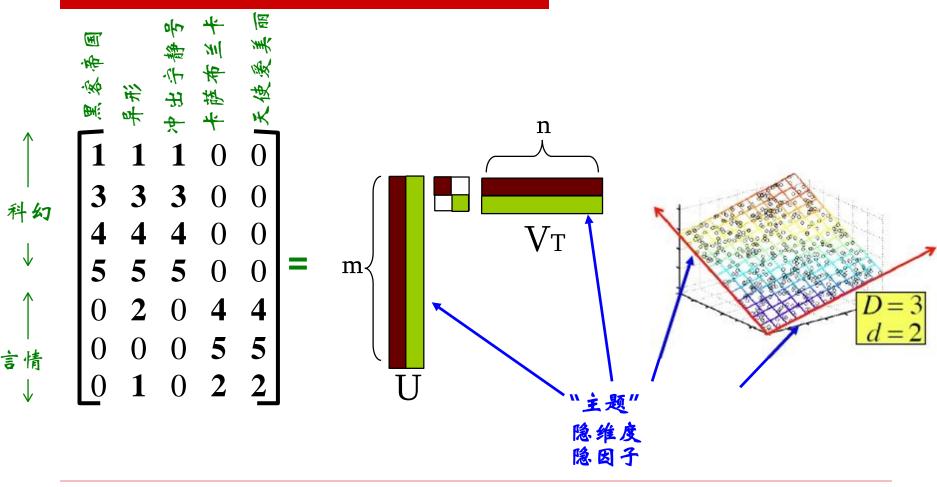
奇异值分解

$\mathbf{A} pprox \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T = \sum_i \sigma_i \mathbf{u}_i \circ \mathbf{v}_i^{\mathsf{T}}$



SVD的性质

- \square 对于一个实数矩阵,总能够拆解成三个矩阵 相乘A=U \sum V_T
- □ 这三个矩阵满足如下性质:
 - U、∑、V 是唯一的
 - ■U、V的列是单位标准正交基
 - ∑是对角阵,对角上每一个值是奇异值, 是正数,并且按降序排序。



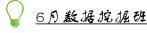
黑

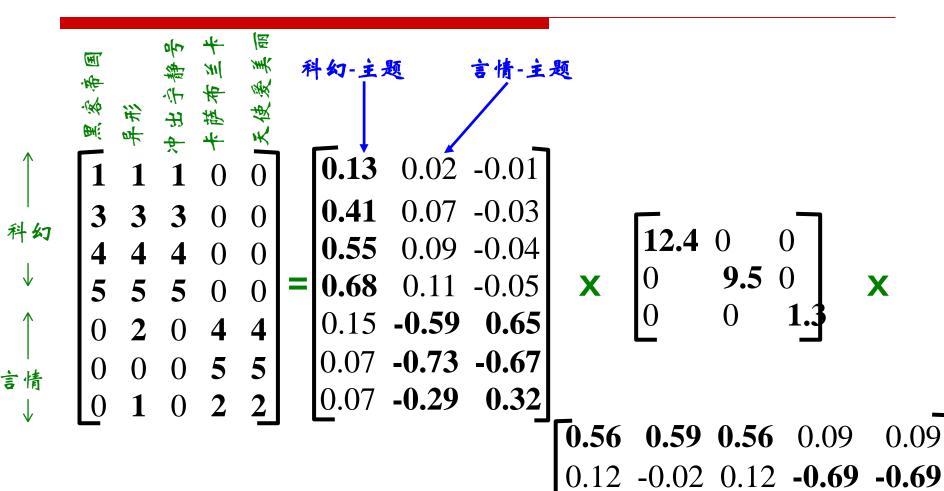
$$\mathbf{x} \begin{bmatrix} \mathbf{12.4} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{9.5} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1.3} \end{bmatrix} \mathbf{x}$$

 0.56
 0.59
 0.56
 0.09
 0.09

 0.12
 -0.02
 0.12
 -0.69
 -0.69

 0.40
 -0.80
 0.40
 0.09
 0.09

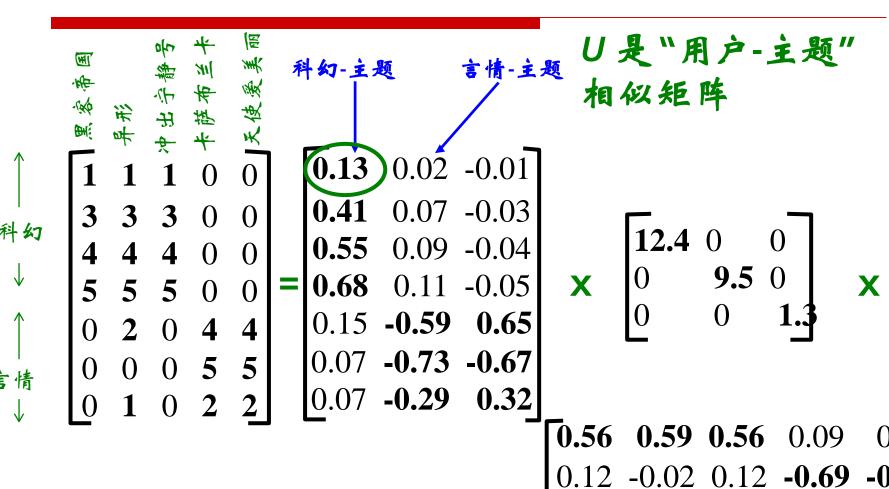






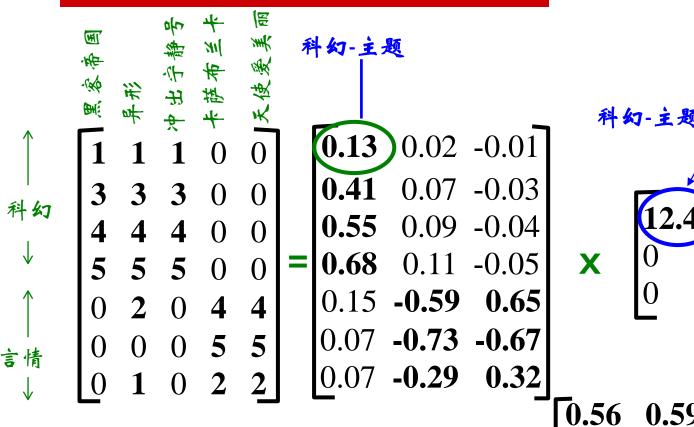
-0.80 0.40

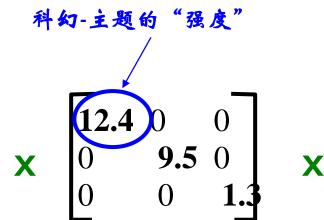
0.09



-0.80 0.40

0.09



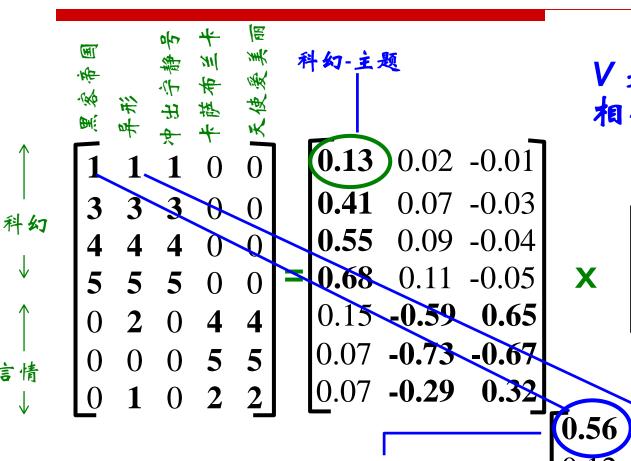


 0.56
 0.59
 0.56
 0.09
 0.09

 0.12
 -0.02
 0.12
 -0.69
 -0.69

 0.40
 -0.80
 0.40
 0.09
 0.09





V是"电影-主题" 相似矩阵

$$\mathbf{x} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{12.4} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{9.5} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1.3} \end{bmatrix} \quad \mathbf{x}$$

0.59 0.56 0.09

科幻-主题

V 6月数据挖掘班

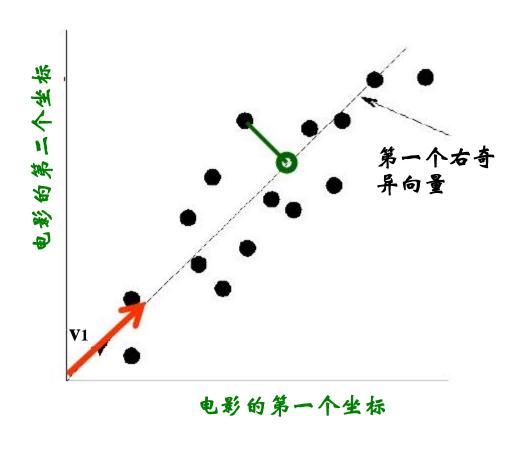
0.12 -0.02 0.12 **-0.69 -0.69** 0.40 **-0.80** 0.40 0.09 0.09

SVD的深入理解

□"电影"、"用户"和"主题"

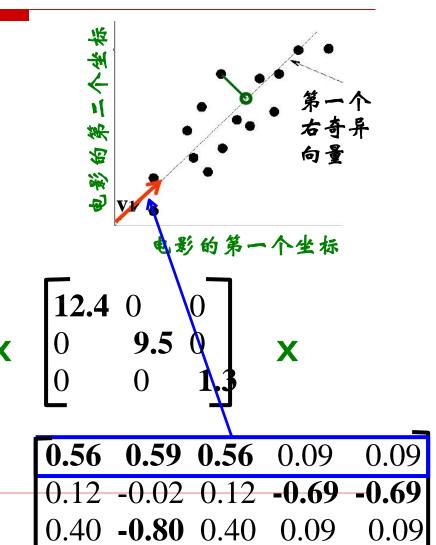
- U: "用户-主题"相似矩阵
- V:"电影-主题"相似矩阵
- Σ : 其对角元素是每一个主题的"强度"

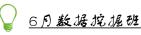
- □ SVD能够给出 "最好"的结果
 - 所谓"最好"就是使得平分误差(投影)最小



- $\blacksquare A = U \sum V_T$
- U: "用户-主题"相似矩阵
- V:"电影-主题"相似矩阵

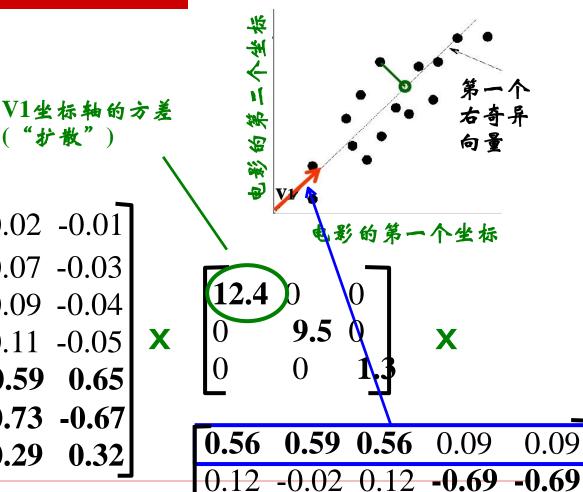
$$\begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ \mathbf{3} & \mathbf{3} & \mathbf{3} & 0 & 0 \\ \mathbf{4} & \mathbf{4} & \mathbf{4} & 0 & 0 \\ \mathbf{5} & \mathbf{5} & \mathbf{5} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{2} & 0 & \mathbf{4} & \mathbf{4} \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0.13} & 0.02 & -0.01 \\ \mathbf{0.41} & 0.07 & -0.03 \\ \mathbf{0.41} & 0.07 & -0.03 \\ \mathbf{0.55} & 0.09 & -0.04 \\ \mathbf{0.15} & -0.59 & 0.65 \\ 0.07 & -0.73 & -0.67 \\ 0.07 & -0.29 & 0.32 \end{bmatrix}$$





$$\blacksquare A = U \sum V_T$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ \mathbf{3} & \mathbf{3} & \mathbf{3} & 0 & 0 \\ \mathbf{4} & \mathbf{4} & \mathbf{4} & 0 & 0 \\ \mathbf{5} & \mathbf{5} & \mathbf{5} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{2} & 0 & \mathbf{4} & \mathbf{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0.13} & 0.02 & -0.01 \\ \mathbf{0.41} & 0.07 & -0.03 \\ \mathbf{0.55} & 0.09 & -0.04 \\ \mathbf{0.68} & 0.11 & -0.05 \\ 0.15 & \mathbf{-0.59} & \mathbf{0.65} \end{bmatrix}$$



-0.80 0.40

0.09



5

("扩散")

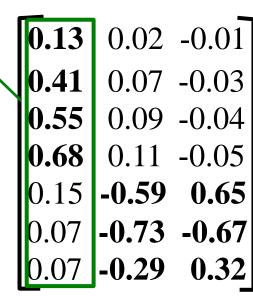
0.07 **-0.73 -0.67**

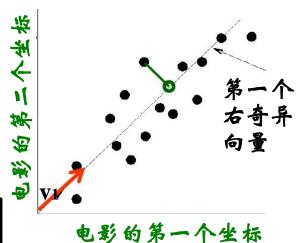
0.07 -0.29

 $\blacksquare A = U \sum V_T$

用户坐标在"科幻-主题"坐标轴上的投影 $(U\Sigma)^T$:

| 1 | 1 | 1 | 0 | 0 |
|---|---|---|---|---|
| 3 | 3 | 3 | 0 | 0 |
| 4 | 4 | 4 | 0 | 0 |
| 5 | 5 | 5 | 0 | 0 |
| 0 | 2 | 0 | 4 | 4 |
| 0 | 0 | 0 | 5 | 5 |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 2 |





□ Q:SVD怎么降维?能够精确到什么程度?

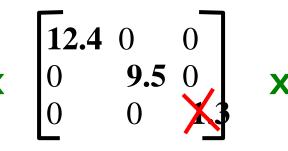
12.4 0 0 0 9.5 0 0 0 1.3

0.56 0.59 0.56 0.09 0.09 0.12 -0.02 0.12 -**0.69** -**0.69** 0.40 -**0.80** 0.40 0.09 0.09

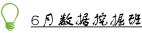


- □ Q:SVD怎么降维?能够精确到什么程度?
- □ A:把最小的奇异值设为0

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 3 & 0 & 0 \\ 4 & 4 & 4 & 0 & 0 \\ 5 & 5 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.13 & 0.02 & -0.01 \\ 0.41 & 0.07 & -0.03 \\ 0.55 & 0.09 & -0.04 \\ 0.68 & 0.11 & -0.05 \\ 0.15 & -0.59 & 0.65 \\ 0.07 & -0.73 & -0.67 \\ 0.07 & -0.29 & 0.32 \end{bmatrix}$$

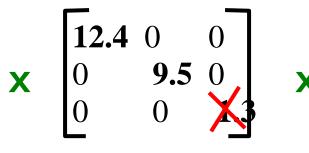


0.56 0.59 0.56 0.09 0.09 0.12 -0.02 0.12 -**0.69** -**0.69** 0.40 -**0.80** 0.40 0.09 0.09



- □ Q:SVD怎么降维?能够精确到什么程度?
- □ A:把最小的奇异值设为0

| 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | | 0.13 | 0.02 | -0.01 |
|---|---|---|---|---|----|------|-------|-------|
| 3 | 3 | 3 | 0 | 0 | | 0.41 | 0.07 | -0.03 |
| 4 | 4 | 4 | 0 | 0 | | | 0.09 | |
| 5 | 5 | 5 | 0 | 0 | 22 | 0.68 | 0.11 | -0.05 |
| 0 | 2 | 0 | 4 | 4 | | 0.15 | -0.59 | 0.65 |
| 0 | 0 | 0 | 5 | 5 | | | -0.73 | |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 2 | | 0.07 | -0.29 | 0.32 |



0.56 0.59 0.56 0.09 0.09 0.12 -0.02 0.12 -0.69 -0.69 0.40 -0.80 0.40 0.09 0.09



- □ Q:SVD怎么降维?能够精确到什么程度?
- □ A:把最小的奇异值设为0

| 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | | 0.13 | 0.02 | -0 .0 | -)[|
|---|---|---|---|---|----|------|-------|--------------|---------|
| 3 | 3 | 3 | 0 | 0 | | 0.41 | 0.07 | -00 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 0 | 0 | | 0.55 | 0.09 | -0.0 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 0 | 0 | 22 | 0.68 | 0.11 | -0. | 5 |
| 0 | 2 | 0 | 4 | 4 | | 0.15 | -0.59 | 0,6 | 5 |
| 0 | 0 | 0 | 5 | 5 | | | -0.73 | | |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 2 | | 0.07 | -0.29 | Ø. 3 | 3 |

0.56 0.59 0.56 0.09 0.09 0.12 -0.02 0.12 -**0.69** -**0.69** 0.40 -**0.39** 0.40 0.09 0.09

- □ Q:SVD怎么降维?能够精确到什么程度?
- □ A:把最小的奇异值设为0

| 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | | 0.13 | 0.02 |
|---|---|---|---|---|----|------|-------|
| 3 | 3 | 3 | 0 | 0 | | 0.41 | 0.07 |
| 4 | 4 | 4 | 0 | 0 | | 0.55 | 0.09 |
| 5 | 5 | 5 | 0 | 0 | 22 | 0.68 | 0.11 |
| 0 | 2 | 0 | 4 | 4 | | 0.15 | -0.59 |
| 0 | 0 | 0 | 5 | 5 | | 0.07 | -0.73 |
| 0 | 1 | 0 | 2 | 2 | | 0.07 | -0.29 |

 $\begin{bmatrix} \mathbf{12.4} & 0 \\ 0 & \mathbf{9.5} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{0.56} & \mathbf{0.59} & \mathbf{0.56} & 0.09 & 0.09 \\ 0.12 & -0.02 & 0.12 & \mathbf{-0.69} & \mathbf{-0.69} \end{bmatrix}$

<u>6月数据挖掘础</u>

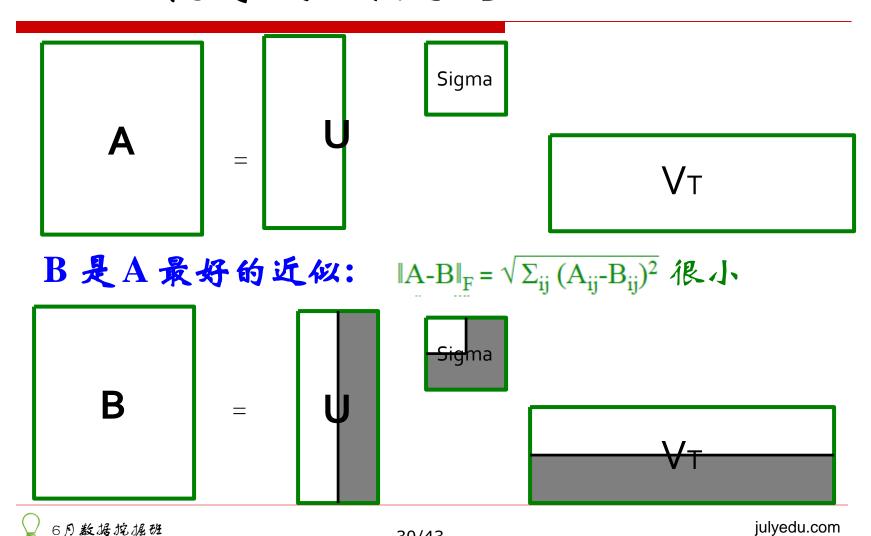
- □ Q:SVD怎么降维?能够精确到什么程度?
- □ A:把最小的奇异值设为0

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ \mathbf{3} & \mathbf{3} & \mathbf{3} & 0 & 0 \\ \mathbf{4} & \mathbf{4} & \mathbf{4} & 0 & 0 \\ \mathbf{5} & \mathbf{5} & \mathbf{5} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{2} & 0 & \mathbf{4} & \mathbf{4} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{5} & \mathbf{5} \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0.92} & \mathbf{0.95} & \mathbf{0.92} & 0.01 & 0.01 \\ \mathbf{2.91} & \mathbf{3.01} & \mathbf{2.91} & -0.01 & -0.01 \\ \mathbf{3.90} & \mathbf{4.04} & \mathbf{3.90} & 0.01 & 0.01 \\ \mathbf{4.82} & \mathbf{5.00} & \mathbf{4.82} & 0.03 & 0.03 \\ 0.70 & \mathbf{0.53} & 0.70 & \mathbf{4.11} & \mathbf{4.11} \\ -0.69 & 1.34 & -0.69 & \mathbf{4.78} & \mathbf{4.78} \\ 0.32 & \mathbf{0.23} & 0.32 & \mathbf{2.01} & \mathbf{2.01} \end{bmatrix}$$

弗罗宾尼斯范数 $\|M\|_F = \sqrt{\sum_{ij} M_{ij}^2} \|A-B\|_F = \sqrt{\sum_{ij} (A_{ij}-B_{ij})^2}$ 很小



SVD:最好的低秩近似



30/43

SVD:最好的低秩近似

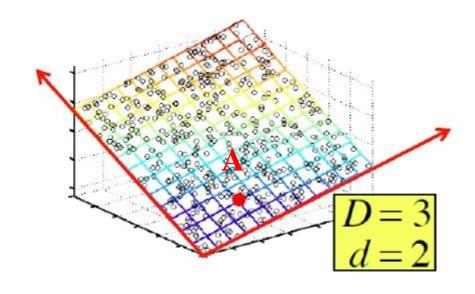
- □ 理论证明:
 - A=U∑V^T 和 B=USV^T, 其中S是r*r的对角矩阵,
 - s_i=σ_i (i=1...k) , 剩下的 s_i=0
 - 于是B是rank(B)=k的情况下对A的最好的近似。
- □ 所谓"最好"是指:
 - B是 ||A-B||_F 在rank(B)=k情况下取最小值的解

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ x_{m1} & & & x_{mn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & & \\ \vdots & \ddots & & \\ u_{m1} & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & \dots & V^{\mathsf{T}} \\ 0 & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & & \\ & & & & \\ r \times r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} & \dots & v_{1n} \\ \vdots & \ddots & & \\ & & & \\ r \times r \end{pmatrix}$$

保留多少奇异值

- \square 80-90%的能量 = $\sum_i \sigma_i^2$
 - ——一般经验值

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -2 & -3 & 1 \\ 3 & 5 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{matrix}$$



SVD:计算复杂度

- □ 完全计算复杂度:
 - O(nm²)或O(n²m), 取最小的。
- □ 但是我们可以减少计算量:
 - 如果只需要奇异值
 - 或者只需要前k个奇异向量
 - 或者矩阵是稀疏矩阵
- □ 一般用开源线性运算算法包:
 - LINPACK, SciPy, Matlab, SPlus, Mathematica

案例:给用户推荐电影

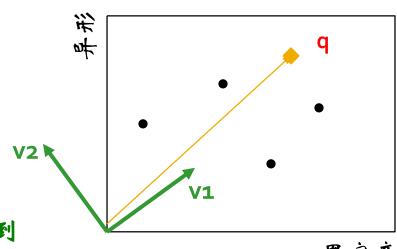
- □ Q:找到潜在喜欢"黑客帝国"电影的用户
- □ A:将用户的搜索统计映射到"主题空间"

34/43

■ ----怎么做?

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

与主题向量的基底做内积,投影到"主题空间"中。



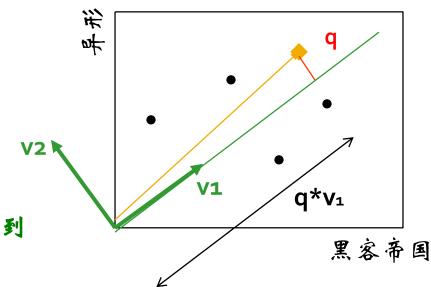
黑客帝国

案例:给用户推荐电影

- □ Q:找到潜在喜欢"黑客帝国"电影的用户
- □ A:将用户的搜索统计映射到"主题空间"
 - ----怎么做?

$$q = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

与主题向量的基底做内积,投影到"主题空间"中。



案例: 给用户推荐电影

- □ 也就是说,我们有
- $\Box q_{\underline{*}} = qV$

电影-主题近似 转换矩阵(V)

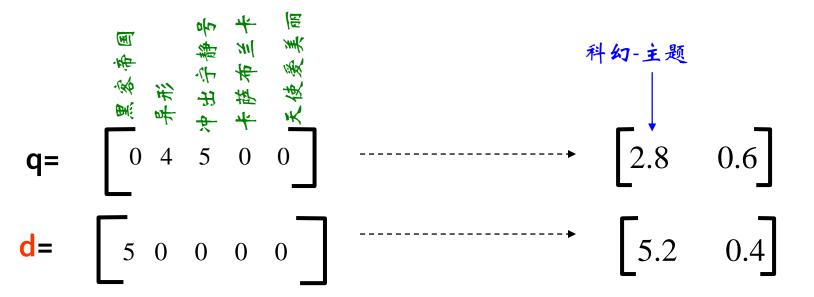
案例:给用户推荐电影

- □对于喜欢"异形"、"冲出宁静号"的用户d
- □ d_{主题}=dV

电影-主题近似 转换矩阵(V)

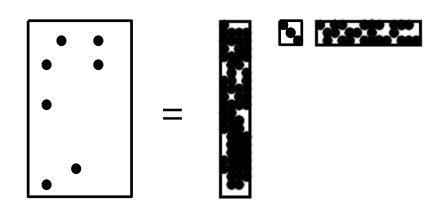
案例:给用户推荐电影

□ 观察:用户d与用户q是相似的,虽然他们在原始坐标下是正交的!



SVD降维的特点

- □ 奇异向量
 - 每一个奇异向量是所有输入矩阵的行向量或列 向量的线性组合
- □ 奇异向量是稠密的



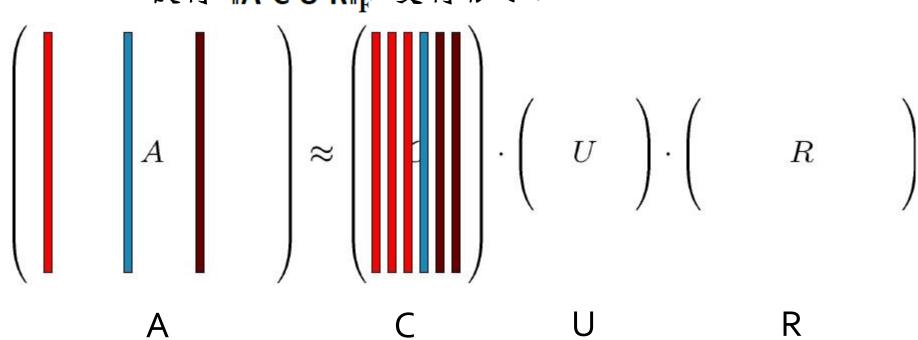
SVD代码

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy import linalg
>>> A = np. array([[1, 2, 3], [4, 5, 6]])
>>> A
array([[1, 2, 3],
     [4, 5, 6]])
>>> M, N = A. shape
>>> U, s, Vh = linalg, svd(A)
>>> Sig = linalg. diagsvd(s, M, N)
>>> U, Vh = U, Vh
))) II
array([[-0.3863177 , -0.92236578],
      [-0.92236578, 0.3863177]])
>>> Sig
array([[ 9.508032 , 0. , 0.
     [ 0. , 0.77286964, 0.
>>> Vh
array([[-0.42866713, -0.56630692, -0.7039467],
      [ 0.80596391, 0.11238241, -0.58119908],
      [ 0.40824829, -0.81649658, 0.40824829]])
>>> U. dot(Sig. dot(Vh)) #check computation
array([[ 1., 2., 3.],
      [4., 5., 6.]])
```

julyedu.com

CUR分解简介

- □将矩阵A表示成C、U、R三个矩阵相乘
 - 使得 ||A-C·U·R||_F 变得很小。

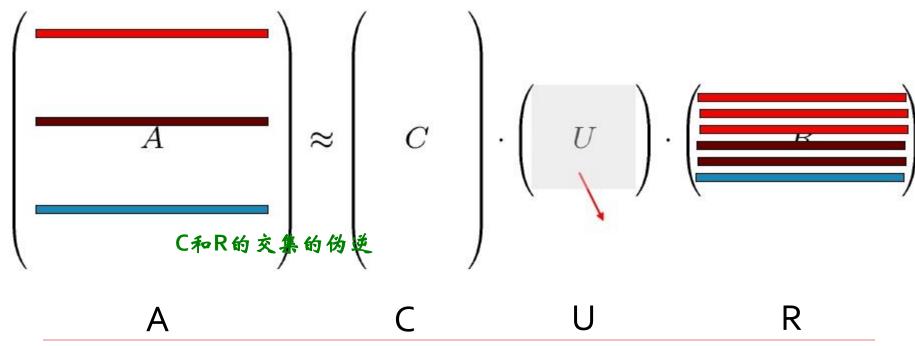


€ 6月数据挖掘班

julyedu.com

CUR分解简介

- □将矩阵A表示成C、U、R三个矩阵相乘
 - 使得 ||A-C·U·R||_F 变得很小。



42/43

julyedu.com

SVD vs. CUR

$$SVD$$
: $A = U \Sigma V^T$ 大却稀疏 大且稠密

感谢大家!

恳请大家批评指正!