



SVD. Eigenfaces. PCA. Линейные системы

Даня Меркулов

МФТИ. AI360



## Сингулярное разложение матрицы

 $A_{m \times n}$ 

=

 $U_{m \times m}$  $\sigma_1$   
 $\sigma_2$   
 $\sigma_3$   
⋮  
 $\sigma_r$  $\Sigma_{m \times n}$  $V^*_{n \times n}$ 

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

 $A_{m \times n}$ 

=

 $U_{m \times m}$  $\sigma_1$   
 $\sigma_2$   
 $\sigma_3$   
...  
 $\sigma_r$  $\Sigma_{m \times n}$  $V_{n \times n}^*$ 

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
- $$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$$

# Сингулярное разложение матрицы

 $A_{m \times n}$ 

=

 $U_{m \times m}$  $\sigma_1$   
 $\sigma_2$   
 $\sigma_3$   
...  
 $\sigma_r$  $\Sigma_{m \times n}$  $V^*_{n \times n}$ 

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  
 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$
- $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  - унитарная матрица правых сингулярных векторов

# Сингулярное разложение матрицы

 $A_{m \times n}$ 

=

 $U_{m \times m}$  $\sigma_1$   
 $\sigma_2$   
 $\sigma_3$   
...  
 $\sigma_r$  $\Sigma_{m \times n}$  $V^*_{n \times n}$ 

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  
 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$
- $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  - 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  $\|A - A_r\|_F = \sqrt{\sigma_{r+1}^2 + \dots + \sigma_{\min(n,m)}^2}$ .

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

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

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:

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

## Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

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

### Решение

1. Простейшая форма SVD выглядит так:

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

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

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

## Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

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

3. Вычислим  $A^T A$ :

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

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

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

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

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

## Пример 1

Найдите SVD следующей матрицы:

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

3. Вычислим  $A^T A$ :

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

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

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

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

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

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

## 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  $w_{(1)}$ , 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  $w_{(1)}$ , что приводит к следующей задаче оптимизации:

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

## 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:

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

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

## 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  $w_{(1)}$ , что приводит к следующей задаче оптимизации:

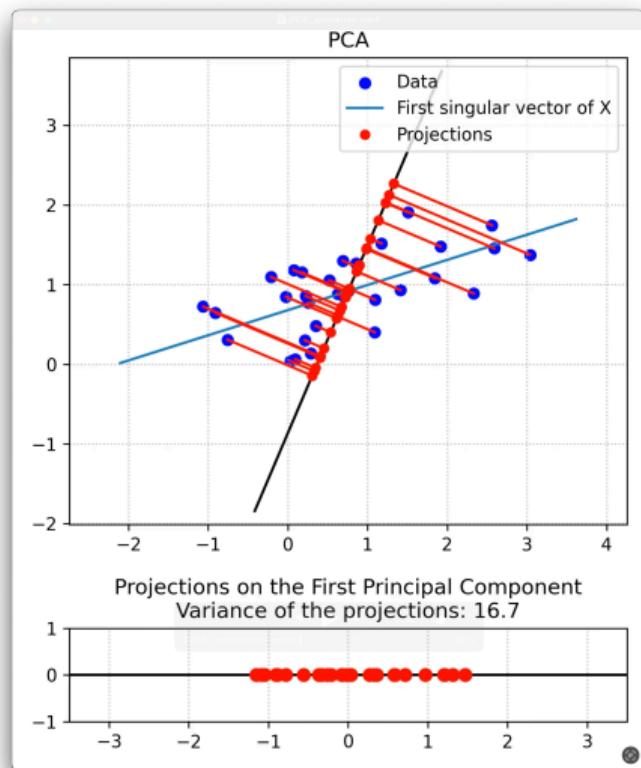
$$w_{(1)} = \arg \max_{\|w\|=1} \left\{ \sum_i (a_{(i)}^\top \cdot w)^2 \right\}$$

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

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

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

## 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  $w_{(1)}$ , что приводит к следующей задаче оптимизации:

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

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

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

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

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:

$$\Pi_{n \times k} = A_{n \times d} \cdot W_{d \times k}$$

## 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  $A^T A$ .

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

Сначала мы запишем SVD нашей матрицы:

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

## Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение:

$$\Pi_{n \times k} = A_{n \times d} \cdot W_{d \times k}$$

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

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: Теперь рассмотрим матрицу  $AA^\top$ :

$$\Pi_{n \times k} = A_{n \times d} \cdot W_{d \times k}$$

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:

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

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

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

## Вывод метода

Таким образом, мы можем заключить, что следующее отображение: Теперь рассмотрим матрицу  $AA^\top$ :

$$\Pi_{n \times k} = A_{n \times d} \cdot W_{d \times k}$$

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:

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

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

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

В итоге:

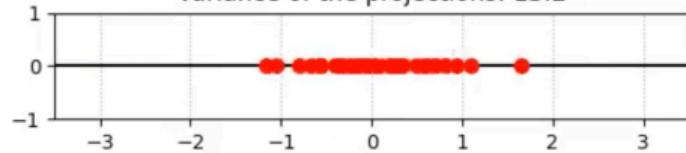
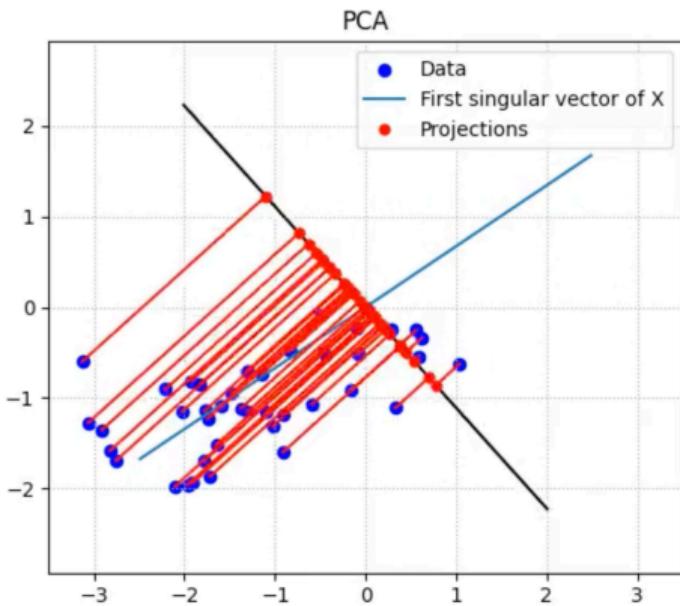
$$\begin{aligned} \Pi &= A \cdot W = \\ &= U\Sigma W^\top W = U\Sigma \end{aligned}$$

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

$$\Pi_r = U_r \Sigma_r$$

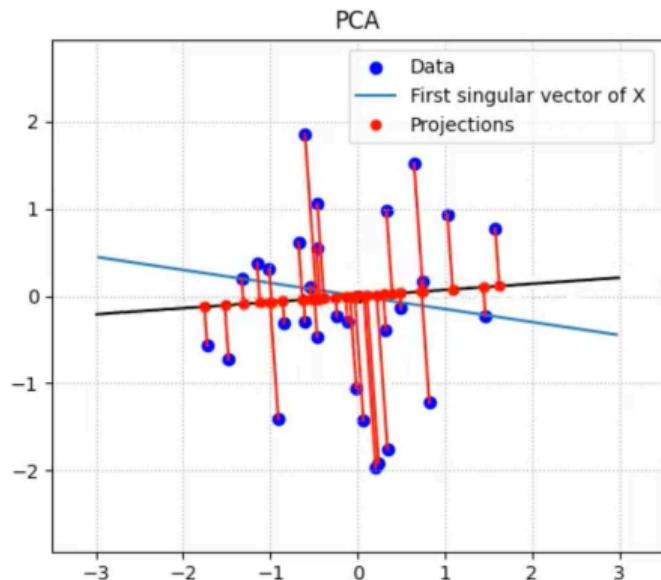
# PCA. Упражнение 1

Что могло пойти не так с этим PCA?

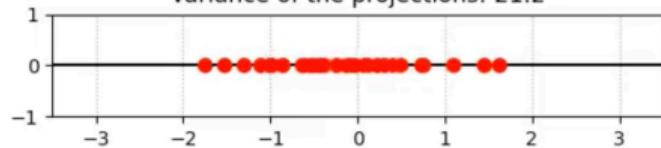


## PCA. Упражнение 2

Что могло пойти не так с этим PCA?

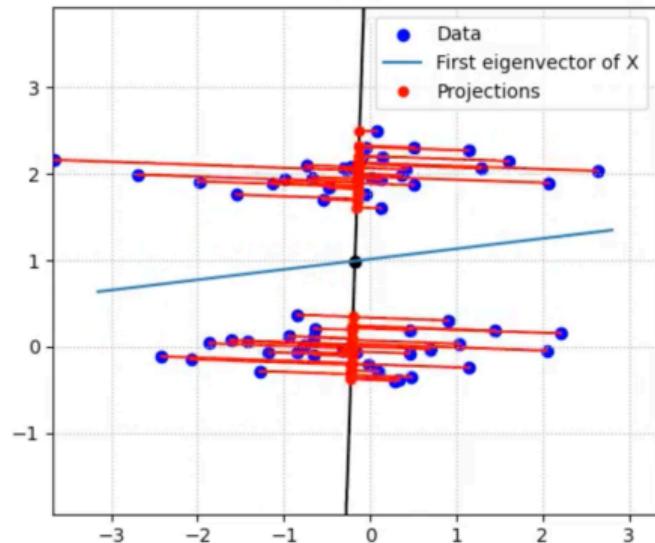


Projections on the First Principal Component  
Variance of the projections: 21.2

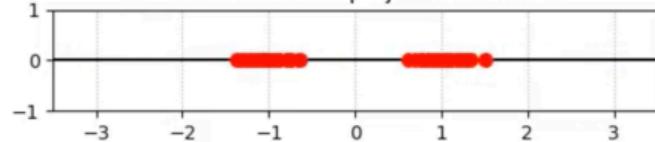


## PCA. Упражнение 3

PCA

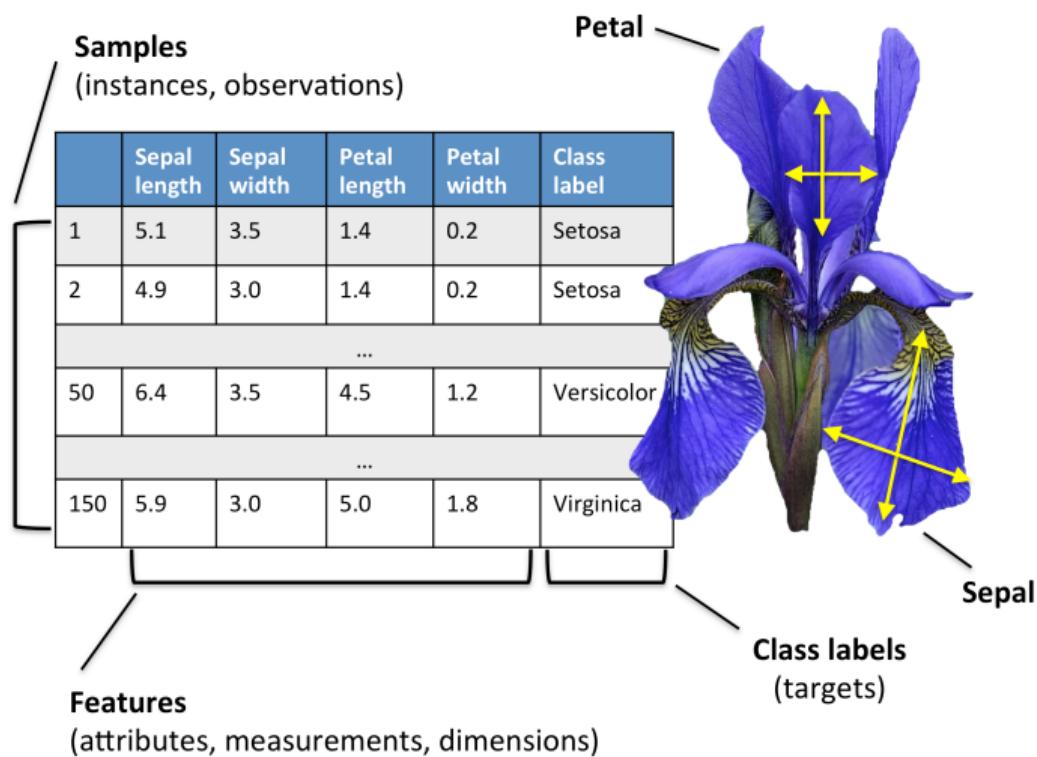


Projections on the First Principal Component  
Variance of the projections: 65.7

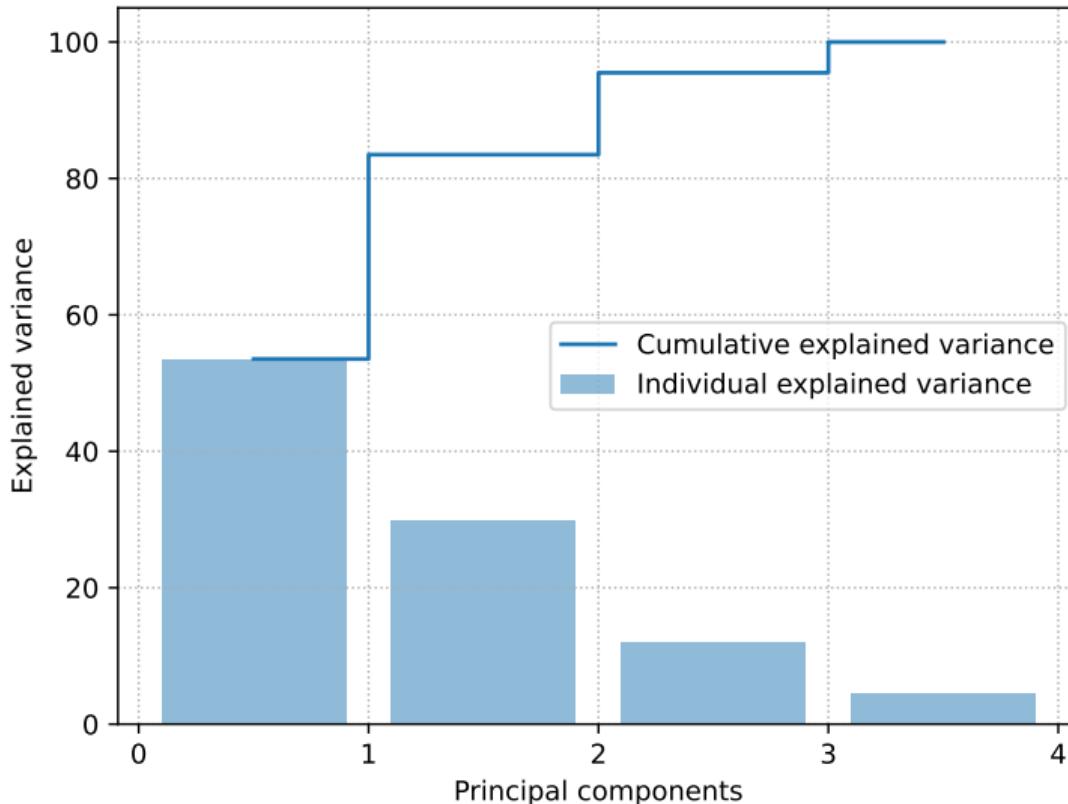


Что могло пойти не так с этим PCA?

# Iris dataset variance



## Iris dataset variance



## Wine dataset variance



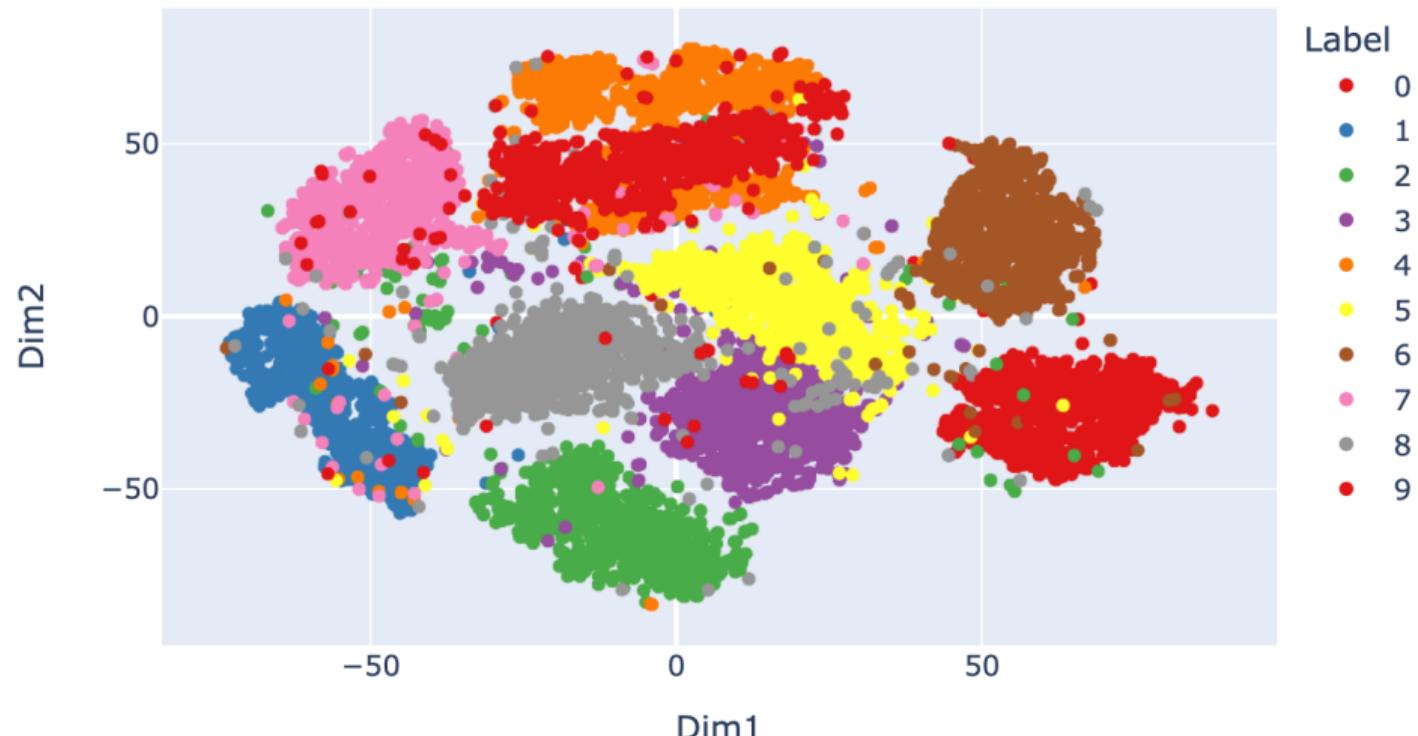
# PCA on MNIST

## 2D PCA of MNIST



# t-SNE on MNIST

## 2D t-SNE of MNIST



# UMAP on MNIST

2D UMAP of MNIST

