PCA: Метод главных компонент

Пример 1: моделирование Монте-Карло

Рассмотрим $n := 3$ признаков в задаче ML. Каждое их сочетание задает выборочное значение вектора в пространстве R3.**x**=(x0,x1,x2)=(x,y,z). Будем считать, что признаки коррелированы, а именно: $z(x,y) := 0 + 2\ x - 5\ y$.

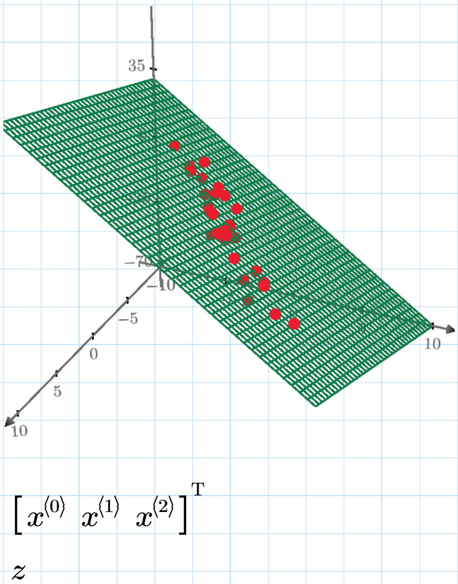
Сгенерируем псевдослучайную выборку объема $N := 30$, причем пусть x,y будут независимыми, а z = z(x,y) + шум, интенсивность которого возьмем равной $\sigma := 10$.

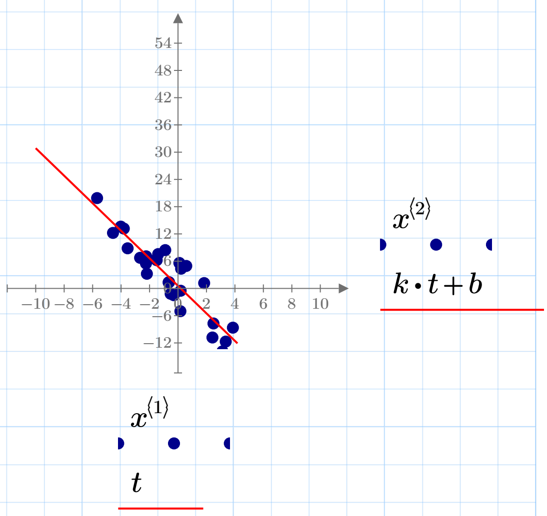
Т.е. наша выборка = это $N = 30$ псевдослучайных векторов в пространстве R3, которые можно объединить в матрицу Nxn:

$$x = \begin{bmatrix} -0.592 & 0.167 & -5.012 \\ -0.168 & -1.394 & 7.561 \\ -3.016 & -4.02 & 13.608 \\ 3.411 & 2.491 & -7.716 \\ -1.641 & -2.187 & 3.23 \\ 4.626 & 3.354 & -11.703 \\ & & \vdots \end{bmatrix}$$

В силу коррелированности, все точки (векторы в R3) расположены вблизи плоскости: z(x,y)

Причем, чем меньше шум $s = 1\ s$, тем все точки ближе к плоскости (при нулевом шуме они точно лежат в плоскости):





Мы хотим снизить размерность: найти признаки - комбинацию коррелированных признаков и оставить только их.

Расчет 1: R2 --> R1

Сначала (для наглядности) можно рассмотреть более простой случай - проекцию пространства R3. Новый признак будет задаваться вектором v. Как его найти?

1-й вариант - вручную (построить лин.регрессию по МНК):

$V(K)=\begin{bmatrix}0.282\\-0.959\end{bmatrix}$ и ортогональный ему, "лишний" вектор $V2(K)=\begin{bmatrix}-0.959\\-0.282\end{bmatrix}$

$V(K)\cdot V2(K)=0$

2-й вариант - через ковариационную матрицу:

$\operatorname{cvar}\left(x^{\langle 1\rangle},x^{\langle 2\rangle}\right)=-24.512$

$\operatorname{corr}\left(x^{\langle 1\rangle},x^{\langle 2\rangle}\right)=-0.938$

$\dfrac{\operatorname{cvar}\left(x^{\langle 1\rangle},x^{\langle 2\rangle}\right)}{\operatorname{stdev}\left(x^{\langle 1\rangle}\right)\cdot\operatorname{stdev}\left(x^{\langle 2\rangle}\right)}=-0.938$

$$A:=\begin{bmatrix}\operatorname{cvar}\left(x^{\langle 1\rangle},x^{\langle 1\rangle}\right) & \operatorname{cvar}\left(x^{\langle 1\rangle},x^{\langle 2\rangle}\right)\\ \operatorname{cvar}\left(x^{\langle 1\rangle},x^{\langle 2\rangle}\right) & \operatorname{cvar}\left(x^{\langle 2\rangle},x^{\langle 2\rangle}\right)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8.088 & -24.512\\ -24.512 & 84.361\end{bmatrix}$$

Надо посчитать ее с.з. и с.в.. И как раз с.в., имеющий максимальное с.з., будет главным направлением (сравнить результат с вариантом 1):

$\mathrm{L}:=\operatorname{eigenvals}(A)=\begin{bmatrix}91.559\\0.89\end{bmatrix}$

$\operatorname{eigenvec}\left(A,\mathrm{L}_0\right)=\begin{bmatrix}-0.282\\0.959\end{bmatrix}$ $\operatorname{eigenvec}\left(A,\mathrm{L}_1\right)=\begin{bmatrix}0.959\\0.282\end{bmatrix}$

$V(K)=\begin{bmatrix}0.282\\-0.959\end{bmatrix}$ $V2(K)=\begin{bmatrix}-0.959\\-0.282\end{bmatrix}$ $\operatorname{eigenvec}\left(A,\mathrm{L}_0\right)\cdot V(K)=-1$

$V\left(r_{d_0}\right)=\begin{bmatrix}0.282\\-0.959\end{bmatrix}$ $V2\left(r_{d_0}\right)=\begin{bmatrix}-0.959\\-0.282\end{bmatrix}$

Расчет 2 - в 3D: R3 --> R2

$i0:=0..2$ $i1:=0..2$

$Cov_{i0,i1}:=\operatorname{cvar}\left(x^{\langle i0\rangle},x^{\langle i1\rangle}\right)$ $Cov=\begin{bmatrix}7.863 & 7.373 & -20.705\\ 7.373 & 8.088 & -24.512\\ -20.705 & -24.512 & 84.361\end{bmatrix}$

$$L := \mathrm{eigenvals}(Cov) = \begin{bmatrix} 96.964 \\ 3.111 \\ 0.237 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{eigenvec}(Cov, L_0) = \begin{bmatrix} -0.239 \\ -0.277 \\ 0.931 \end{bmatrix} \qquad \left\| \mathrm{eigenvec}(Cov, L_0) \right\| = 1$$

$$\mathrm{eigenvec}(Cov, L_1) = \begin{bmatrix} 0.853 \\ 0.398 \\ 0.337 \end{bmatrix} \qquad \mathrm{eigenvec}(Cov, L_0) \cdot \mathrm{eigenvec}(Cov, L_1) = 0$$

$$\mathrm{eigenvec}(Cov, L_2) = \begin{bmatrix} -0.463 \\ 0.875 \\ 0.141 \end{bmatrix}$$

Расчет 3 - через SVD

Тот же самый результат (т.е. новый базис) можно получить, если использовать SVD ковариационной матрицы $Cov = V \cdot S \cdot V^T$. Сравните с.з. ковариационной матрицы и сингулярные числа S:

$$L = \begin{bmatrix} 96.964 \\ 3.111 \\ 0.237 \end{bmatrix} \qquad s := \mathrm{svd}(Cov)_0 = \begin{bmatrix} 96.964 \\ 3.111 \\ 0.237 \end{bmatrix} \qquad S := \mathrm{diag}(s) = \begin{bmatrix} 96.964 & 0 & 0 \\ 0 & 3.111 & 0 \\ 0 & 0 & 0.237 \end{bmatrix}$$

и столбцы ортогональной матрицы V с с.в. ковариационной матрицы:

$$U := \mathrm{svd}(Cov)_1 = \begin{bmatrix} -0.239 & -0.853 & 0.463 \\ -0.277 & -0.398 & -0.875 \\ 0.931 & -0.337 & -0.141 \end{bmatrix} \qquad \mathrm{eigenvec}(Cov, L_0) = \begin{bmatrix} -0.239 \\ -0.277 \\ 0.931 \end{bmatrix}$$

$$V := {\mathrm{svd}(Cov)_2}^T = \begin{bmatrix} -0.239 & -0.853 & 0.463 \\ -0.277 & -0.398 & -0.875 \\ 0.931 & -0.337 & -0.141 \end{bmatrix} \qquad \mathrm{eigenvec}(Cov, L_1) = \begin{bmatrix} 0.853 \\ 0.398 \\ 0.337 \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{eigenvec}(Cov, L_2) = \begin{bmatrix} -0.463 \\ 0.875 \\ 0.141 \end{bmatrix}$$

$$V^{-1} = \begin{bmatrix} -0.239 & -0.277 & 0.931 \\ -0.853 & -0.398 & -0.337 \\ 0.463 & -0.875 & -0.141 \end{bmatrix}$$

$$V^T = \begin{bmatrix} -0.239 & -0.277 & 0.931 \\ -0.853 & -0.398 & -0.337 \\ 0.463 & -0.875 & -0.141 \end{bmatrix}$$

Таким образом, SVD-разложение ковариационной матрицы задает главные компоненты данных и его можно записать как:

$$\mathrm{V}\cdot\mathrm{S}\cdot\mathrm{V}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}7.863 & 7.373 & -20.705\\ 7.373 & 8.088 & -24.512\\ -20.705 & -24.512 & 84.361\end{bmatrix}\qquad Cov=\begin{bmatrix}7.863 & 7.373 & -20.705\\ 7.373 & 8.088 & -24.512\\ -20.705 & -24.512 & 84.361\end{bmatrix}$$

Нормы матрицы (Фробениуса и евклидова) также можно получить через SVD:

$$\sum_{i=0}^{2}\sum_{j=0}^{2}{Cov_{i,j}}^{2}=9.412\cdot10^{3}\qquad \sum s^{2}=9.412\cdot10^{3}$$

$$\mathrm{norme}(Cov)=97.015\qquad s_{0}=96.964$$

Расчет 4 - SVD самих данных X

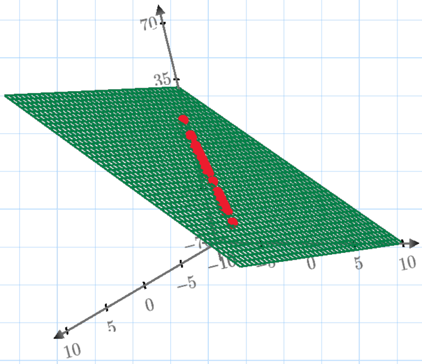
$$s:=\mathrm{svd}(x)_{0}=\begin{bmatrix}54.524\\ 9.728\\ 2.674\end{bmatrix}\qquad \mathrm{S}:=\mathrm{diag}(s)=\begin{bmatrix}54.524 & 0 & 0\\ 0 & 9.728 & 0\\ 0 & 0 & 2.674\end{bmatrix}\qquad X=U\cdot S\cdot V^{\mathrm{T}}$$

$$\mathrm{U}:=\mathrm{svd}(x)_{1}\qquad \mathrm{V}:=\mathrm{svd}(x)_{2}^{\;\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}0.237 & 0.853 & -0.466\\ 0.275 & 0.401 & 0.874\\ -0.932 & 0.335 & 0.139\end{bmatrix}$$

$$\sum_{i=0}^{2}\mathrm{U}^{\langle i\rangle}\cdot s_{i}\cdot\left(\mathrm{V}^{\langle i\rangle}\right)^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}-0.592 & 0.167 & -5.012\\ -0.168 & -1.394 & 7.561\\ -3.016 & -4.02 & 13.608\\ 3.411 & 2.491 & -7.716\\ -1.641 & -2.187 & 3.23\\ & & \vdots\end{bmatrix}\qquad x=\begin{bmatrix}-0.592 & 0.167 & -5.012\\ -0.168 & -1.394 & 7.561\\ -3.016 & -4.02 & 13.608\\ 3.411 & 2.491 & -7.716\\ -1.641 & -2.187 & 3.23\\ 4.626 & 3.354 & -11.703\\ & & \vdots\end{bmatrix}$$

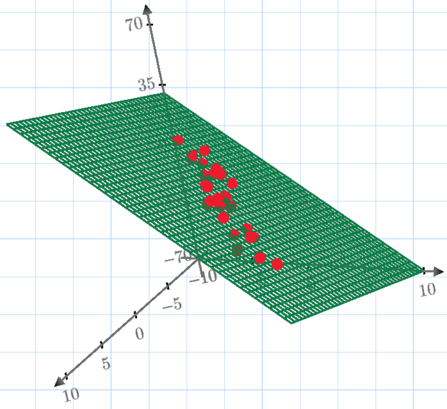
$$M:=1$$

$$xx:=\sum_{i=0}^{M-1}\mathrm{U}^{\langle i\rangle}\cdot s_{i}\cdot\left(\mathrm{V}^{\langle i\rangle}\right)^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}1.083 & 1.258 & -4.265\\ -1.768 & -2.052 & 6.96\\ -3.432 & -3.984 & 13.512\\ 2.055 & 2.386 & -8.092\\ -0.947 & -1.099 & 3.727\\ 3.059 & 3.551 & -12.043\\ & & \vdots\end{bmatrix}$$



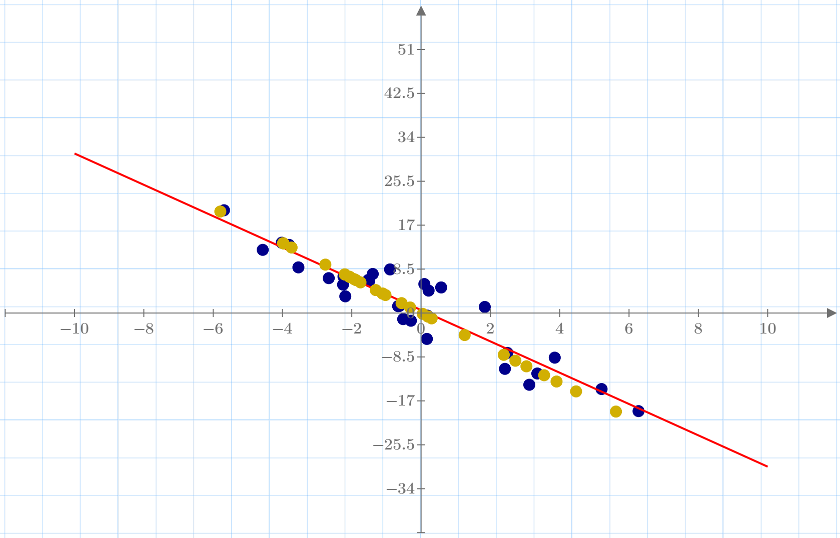
$\left[xx^{\langle 0 \rangle} \;\; xx^{\langle 1 \rangle} \;\; xx^{\langle 2 \rangle} \right]^{\mathrm{T}}$

z



$\left[x^{\langle 0 \rangle} \;\; x^{\langle 1 \rangle} \;\; x^{\langle 2 \rangle} \right]^{\mathrm{T}}$

z



$x^{\langle 2 \rangle}$

$k \cdot t + b$

$xx^{\langle 2 \rangle}$

$x^{\langle 1 \rangle}$

t

$xx^{\langle 1 \rangle}$