Сингулярное разложение (SVD разложение) и метод главных компонент (PCA)

Морозов Леонид, 519/2

1 ноября 2022 г.

1 SVD разложение

SVD разложение - разложение, широко использующееся для вычисления ранга, ядра матрицы, псевдообратной матрицы, и особенно для приближения матриц матрицами заданного ранга.

Пусть матрица $M \in K^{m \times n}$, где K - или R (поле вещественных чисел), или C (поле комплексных чисел). Для удобства приведем все необходимые определения с учётом того, что K=R.

Definition 1 ***(Ортогональная матрица)***
Матрица $M \in R^{n \times n}$ называется ортогональной, если $MM^T = M^T M = I$

Definition 2 ***(Сингулярные числа и сингулярные векторы)***
Неотрицательное вещественное число σ называется сингулярным числом матрицы M, когда существуют два вектора единичной длины $u \in R^m$ и $v \in R^n$ такие, что:

$$Mv = \sigma u, M^T u = \sigma v,$$

где M^* - сопряжённо-транспонированная матрица к M.

Такие векторы u и v называются, соответственно, левым сингулярным вектором и правым сингулярным вектором, соответствующим сингулярному числу σ.

Definition 3 ***(SVD разложение)***
Сингулярным разложением матрицы $M \in R^{m \times n}$ называется разложение следующего вида:

$$M = U \Sigma V^T,$$

где $\Sigma \in R^{m \times n}$ - матрица с неотрицательными элементами, у которой элементы, лежащие на главной диагонали — это сингулярные числа σ_i (а *все элементы, не лежащие на главной диагонали, являются нулевыми), а матрицы $U \in R^{m\times m}$ и $V \in R^{n\times n}$ — это две ортогональные матрицы, состоящие из левых и правых сингулярных векторов соответственно.*

2 Метод главных компонент (PCA)

Очень часто в процессе решения задач с большим количеством данных (с данными большой размерности) бывает полезно уменьшить их размерность для упрощения визуализации данных, уменьшения необходимого объёма памяти и ускорения вычислений. По сути метод главных компонент является одним из главных методов уменьшения размерности данных с наименьшей потерей исходной информации.

Вычисление главных компонент может быть сведено к вычислению сингулярного разложения матрицы данных, т.е. SVD разложение позволяет приблизить исходную матрицу M матрицей $M_k : rang(M_k) = k \leq rang(M)$ с наименьшей потерей исходной информации о данных. Об этом следующая теорема:

Theorem 1 ***(Теорема Эккарта-Янга)***
Для данной матрицы $M \in R^{m\times n}$ существует её апроксимация меньшего ранга M_k $(rang(M_k) = k \leq rang(M)) : \forall B_k$ $(rang(B_k) = k \leq rang(M))$ $\|M - M_k\|_F \leq \|M - B_k\|_F$, где $\|\cdot\|_F$ - норма Фробениуса.
Получить эту апроксимацию M_k можно, если при сингулярном разложении матрицы M расставить сингулярные числа σ_i в Σ по диагонали в невозрастающем порядке слева направо, сделав при этом соответствующие перестановки строк в U и столбцов в V^T, и занулить все значения в Σ, кроме первых k, и соответствующие строки в U и столбцы в V^T.

2.1 Геометрический смысл PCA

По сути SVD разложение матрицы данных M означает приведение к базису нормированных собственных векторов матрицы M^TM(которая состоит из всех возможных скалярных произведений). Таким образом, на диагонали матрицы Σ, полученной при SVD разложении матрицы M будут корни из собственных значений матрицы M^TM(сингулярные числа матрицы M), который будут показывать разброс по соответствующим нормированным собственным векторам. Именно поэтому при получении наилучшей (в смысле минимизации нормы Фробениуса) апроксимации матрицы оставляются наибольшие σ_i - данные проще различать по тем направлениям, где разброс больше $\Rightarrow$ меньше информации о данных будет утеряно. Что касается матриц U и V^T, то по сути они отвечают за повороты, которые необходимы для приведения от одного базиса к другому(т.к. U и V^T ортогональны).

Таким образом, если попытаться простыми словами объяснить, как SVD разложение используется в методе главных компонент, то можно сказать так: сингулярное разложение позволяет снизить размерность признакового пространства с помощью проецирования на некоторое подпространство, по направлениям которого сохраняется наибольший разброс признаков исходного пространства.