Сингулярное разложение и главные компоненты

Обобщение диагонализации

Краткий план:

- Жорданова нормальная форма.

Краткий план:

- Жорданова нормальная форма.
- Сингулярное разложение.

Краткий план:

- Жорданова нормальная форма.
- Сингулярное разложение.
- Доказательство существования.

Не все матрицы диагонализуемы

Утверждение

Квадратная матрица A размера $n \times n$ диагонализуема, если у неё найдётся n линейно независимых собственных векторов.

В этом случае A представима в виде $A = PDP^{-1}$,

где P — матрица из собственных векторов, D — диагональная матрица из собственных значений.

Не все матрицы диагонализуемы

Утверждение

Квадратная матрица A размера $n \times n$ диагонализуема, если у неё найдётся n линейно независимых собственных векторов.

В этом случае A представима в виде $A = PDP^{-1}$,

где P — матрица из собственных векторов, D — диагональная матрица из собственных значений.

Утверждение

У симметричной матрицы A размера $n \times n$ найдётся n ортогональных собственных векторов единичной длины.

С их помощью матрица A представима в виде

$$A = PDP^T.$$

А если не везёт?

Что делать, если у матрицы A размера $n \times n$ меньше, чем n независимых собственных векторов?

А если не везёт?

Что делать, если у матрицы A размера $n \times n$ меньше, чем n независимых собственных векторов?

Утверждение

Любая квадратная матрица A представима в виде

$$A = PJP^{-1},$$

где жорданова нормальная форма J содержит на диагонали жордановы клетки J_i:

$$J = \begin{pmatrix} J_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & J_2 & \dots & \mathbf{0} \\ \dots & \dots & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & J_k \end{pmatrix}, \quad J_i = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_i & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_i \end{pmatrix}$$

Сингулярное разложение

Утверждение

Любой линейный оператор из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ представляет собой последовательность действий:

Сингулярное разложение

Утверждение

Любой линейный оператор из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ представляет собой последовательность действий:

1. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^k$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.

Сингулярное разложение

Утверждение

Любой линейный оператор из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ представляет собой последовательность действий:

1. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^k$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.
2. Растягивание компонент вектора в $\mathbb{R}^k$.

Сингулярное разложение

Утверждение

Любой линейный оператор из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ представляет собой последовательность действий:

1. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^k$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.
2. Растягивание компонент вектора в $\mathbb{R}^k$.
3. Переход из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ путём дописывания нулей в вектор, или зачёркивания части координат.

Сингулярное разложение

Утверждение

Любой линейный оператор из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ представляет собой последовательность действий:

1. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^k$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.
2. Растягивание компонент вектора в $\mathbb{R}^k$.
3. Переход из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ путём дописывания нулей в вектор, или зачёркивания части координат.
4. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^n$ в $\mathbb{R}^n$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.

Сингулярное разложение

Утверждение

Любой линейный оператор из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ представляет собой последовательность действий:

1. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^k$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.
2. Растягивание компонент вектора в $\mathbb{R}^k$.
3. Переход из $\mathbb{R}^k$ в $\mathbb{R}^n$ путём дописывания нулей в вектор, или зачёркивания части координат.
4. Ортогональное преобразование из $\mathbb{R}^n$ в $\mathbb{R}^n$. Сохраняет длины векторов и углы между ними.

Все эти действия мы рассмотрели на первой лекции!

Сингулярное разложение проекции

Оператор H $: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Сингулярное разложение проекции

Оператор H : $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Выберем ортогональный базис $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$ в M.

Сингулярное разложение проекции

Оператор H $: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Выберем ортогональный базис $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$ в M.

Дополним его до ортогонального базиса в $\mathbb{R}^n$ векторами $\mathbf{v}_{k+1}, \ldots, \mathbf{v}_n$.

Сингулярное разложение проекции

Оператор H $: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Выберем ортогональный базис $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$ в M.

Дополним его до ортогонального базиса в $\mathbb{R}^n$ векторами $\mathbf{v}_{k+1}, \ldots, \mathbf{v}_n$.

1. Повернём-отразим пространство, чтобы $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ перешли в $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$.

Сингулярное разложение проекции

Оператор H $: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Выберем ортогональный базис $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$ в M.

Дополним его до ортогонального базиса в $\mathbb{R}^n$ векторами $\mathbf{v}_{k+1}, \ldots, \mathbf{v}_n$.

1. Повернём-отразим пространство, чтобы $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ перешли в $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$.
2. Домножим первые k компонент вектора на 1, а остальные на 0.

Сингулярное разложение проекции

Оператор H : $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Выберем ортогональный базис $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$ в M.

Дополним его до ортогонального базиса в $\mathbb{R}^n$ векторами $\mathbf{v}_{k+1}, \ldots, \mathbf{v}_n$.

1. Повернём-отразим пространство, чтобы $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ перешли в $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$.
2. Домножим первые k компонент вектора на 1, а остальные на 0.
3. Смены размерности нет.

Сингулярное разложение проекции

Оператор H $: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ проецирует векторы на линейную оболочку M.

Выберем ортогональный базис $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_k$ в M.

Дополним его до ортогонального базиса в $\mathbb{R}^n$ векторами $\mathbf{v}_{k+1}, \ldots, \mathbf{v}_n$.

1. Повернём-отразим пространство, чтобы $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ перешли в $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$.
2. Домножим первые k компонент вектора на 1, а остальные на 0.
3. Смены размерности нет.
4. Повернём-отразим пространство, чтобы $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n$ перешли в $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$.

Сингулярное разложение

Утверждение

Любую матрицу A размера $n \times k$ можно представить в виде

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

где матрица U размера $n \times n$ — ортогональная, $U^T U = \mathrm{I}$,

матрица V размера $k \times k$ — ортогональная, $V^T V = \mathrm{I}$,

матрица Σ размера $n \times k$ — диагональная.

Сингулярное разложение

Утверждение

Любую матрицу A размера $n \times k$ можно представить в виде

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

где матрица U размера $n \times n$ — ортогональная, $U^T U = \mathrm{I}$,

матрица V размера $k \times k$ — ортогональная, $V^T V = \mathrm{I}$,

матрица Σ размера $n \times k$ — диагональная.

Данное разложение также называется SVD-разложением, singular value decomposition.

Присмотримся к матрицам

Если $n \geq k$, то SVD-разложение примет вид

$$A = \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{u}_1 & \dots & \mathbf{u}_n \\ | & & | \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_k \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} - & \mathbf{v}_1^T & - \\ & \vdots & \\ - & \mathbf{v}_k^T & - \end{pmatrix}$$

Присмотримся к матрицам

Если $n \geq k$, то SVD-разложение примет вид

$$A = \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{u}_1 & \dots & \mathbf{u}_n \\ | & & | \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_k \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} - & \mathbf{v}_1^T & - \\ & \vdots & \\ - & \mathbf{v}_k^T & - \end{pmatrix}$$

Числа σ_i называются сингулярными числами матрицы A.

Зачем нужно SVD-разложение?

Сильно упрощает многие вычисления.

Зачем нужно SVD-разложение?

Сильно упрощает многие вычисления.

Показывает внутренний мир матрицы.

Зачем нужно SVD-разложение?

Сильно упрощает многие вычисления.

Показывает внутренний мир матрицы.

Существует быстрая и устойчивая итеративная процедура нахождения SVD-разложения.

Раскладываем все матрицы!

Сингулярное разложение для A^T:

$$A^T = (U\Sigma V^T)^T = V\Sigma^T U^T$$

Раскладываем все матрицы!

Сингулярное разложение для A^T:

$$A^T = (U\Sigma V^T)^T = V\Sigma^T U^T$$

Сингулярное разложение для $A^T A$:

$$A^T A = V\Sigma^T U^T \cdot U\Sigma V^T = V\Sigma^T \Sigma V^T$$

Раскладываем все матрицы!

Сингулярное разложение для A^T:

$$A^T = (U\Sigma V^T)^T = V\Sigma^T U^T$$

Сингулярное разложение для $A^T A$:

$$A^T A = V\Sigma^T U^T \cdot U\Sigma V^T = V\Sigma^T \Sigma V^T$$

Сингулярное разложение для AA^T:

$$AA^T = U\Sigma V^T \cdot V\Sigma^T U^T = U\Sigma\Sigma^T U^T$$

Существование разложения

Наша задача предъявить разложение $A = U\Sigma V^T$.

Для удобства будем считать, что $n \geq k$.

Существование разложения

Наша задача предъявить разложение $A = U\Sigma V^T$.

Для удобства будем считать, что $n \geq k$.

Доказательство

1. Матрица $A^T A$ является матрицей Грама. Она положительно определена и симметрична. А потому представима в виде $A^T A = V D V^T$.

Существование разложения

Наша задача предъявить разложение $A = U\Sigma V^T$.

Для удобства будем считать, что $n \geq k$.

Доказательство

1. Матрица $A^T A$ является матрицей Грама. Она положительно определена и симметрична. А потому представима в виде $A^T A = VDV^T$.
2. Диагональные элементы D неотрицательны. Поэтому D представима в виде $\Sigma^T \Sigma$.

Существование разложения

Наша задача предъявить разложение $A = U\Sigma V^T$.

Для удобства будем считать, что $n \geq k$.

Доказательство

1. Матрица $A^T A$ является матрицей Грама. Она положительно определена и симметрична. А потому представима в виде $A^T A = V D V^T$.
2. Диагональные элементы D неотрицательны. Поэтому D представима в виде $\Sigma^T \Sigma$.
3. Осталось найти U из целевого разложения:

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

Существование разложения

Наша задача предъявить разложение $A = U\Sigma V^T$.

Для удобства будем считать, что $n \geq k$.

Доказательство

1. Матрица $A^T A$ является матрицей Грама. Она положительно определена и симметрична. А потому представима в виде $A^T A = VDV^T$.
2. Диагональные элементы D неотрицательны. Поэтому D представима в виде $\Sigma^T \Sigma$.
3. Осталось найти U из целевого разложения:

$$A = U\Sigma V^T \text{ или } AV = U\Sigma$$

Существование разложения

Уже нашли Σ и V. Осталось найти U из $AV = U\Sigma$.

Существование разложения

Уже нашли Σ и V. Осталось найти U из $AV = U\Sigma$.

Окончание доказательства

4. Находим вектора $\mathbf{u}_i$ по очереди:

$$\mathbf{u}_1 = A\mathbf{v}_1/\sigma_1,$$

Существование разложения

Уже нашли Σ и V. Осталось найти U из $AV = U\Sigma$.

Окончание доказательства

4. Находим вектора $\mathbf{u}_i$ по очереди:

$$\mathbf{u}_1 = A\mathbf{v}_1/\sigma_1, \ \mathbf{u}_2 = A\mathbf{v}_2/\sigma_2, \ldots$$

Существование разложения

Уже нашли Σ и V. Осталось найти U из $AV = U\Sigma$.

Окончание доказательства

4. Находим вектора $\mathbf{u}_i$ по очереди:

$$\mathbf{u}_1 = A\mathbf{v}_1/\sigma_1,\ \mathbf{u}_2 = A\mathbf{v}_2/\sigma_2, \ldots$$

5. Вектора $\mathbf{v}_i$ кончатся раньше $\mathbf{u}_i$.

Существование разложения

Уже нашли Σ и V. Осталось найти U из $AV = U\Sigma$.

Окончание доказательства

4. Находим вектора $\mathbf{u}_i$ по очереди:

$$\mathbf{u}_1 = A\mathbf{v}_1/\sigma_1,\ \mathbf{u}_2 = A\mathbf{v}_2/\sigma_2, \ldots$$

5. Вектора $\mathbf{v}_i$ кончатся раньше $\mathbf{u}_i$. Оставшиеся $\mathbf{u}_{k+1}, \ldots, \mathbf{u}_n$ выберем произвольными, чтобы U была ортогональной матрицей.

Авторы современного алгоритма

Джин Говард Голуб

Уильям Мортон Кэхэн

Отец плавающей точки

wikipedia.org / П. Биркен, Д. Биркен, фото номера: П.М. Кроненберг, Клив Молер

Поиск SVD разложения

Это видеофрагмент с доской, слайдов здесь нет :)

Нахождение проекции при известном SVD

Это видеофрагмент с доской, слайдов здесь нет :)

Немного статистики

Краткий план:

- Выборочная дисперсия.

Краткий план:

- Выборочная дисперсия.
- Стандартизация.

Краткий план:

- Выборочная дисперсия.
- Стандартизация.
- Выборочная корреляция.

Центрирование

Определение

Для вектора чисел $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ выборочным средним называют величину

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}.$$

Центрирование

Определение

Для вектора чисел $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ выборочным средним называют величину

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_n}{n}.$$

Определение

Центрирование переменной — переход от набора чисел $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ к набору чисел $(x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \dots, x_n - \bar{x})$.

Центрирование

Определение

Для вектора чисел $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ выборочным средним называют величину

$$\bar{x} = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}.$$

Определение

Центрирование переменной — переход от набора чисел $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ к набору чисел $(x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \dots, x_n - \bar{x})$.

Пример. $(4, 2, 3, 3) \to (1, -1, 0, 0)$.

Свойства центрирования

Утверждение

Если $\mathbf{x}'$ — это центрированный вектор $\mathbf{x}$, $y_i = x_i - \bar{x}$, то $\bar{x}' = 0$.

Свойства центрирования

Утверждение

Если $\mathbf{x}'$ — это центрированный вектор $\mathbf{x}$, $y_i = x_i - \bar{x}$, то $\bar{x}' = 0$.

$$\sum_{i=1}^{n} x_i' = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i - n\bar{x} = 0$$

Свойства центрирования

Утверждение

Если $\mathbf{x}'$ — это центрированный вектор $\mathbf{x}$, $y_i = x_i - \bar{x}$, то $\bar{x}' = 0$.

$$\sum_{i=1}^{n} x_i' = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i - n\bar{x} = 0$$

С геометрической точки зрения:

$(\bar{x}, \bar{x}, \dots, \bar{x})$ — проекция вектора $\mathbf{x}$ на Span $\mathbf{v}$, где $\mathbf{v} = (1, 1, \dots, 1)$.

Свойства центрирования

Утверждение

Если $\mathbf{x}'$ — это центрированный вектор $\mathbf{x}$, $y_i = x_i - \bar{x}$, то $\bar{x}' = 0$.

$$\sum_{i=1}^{n} x_i' = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i - n\bar{x} = 0$$

С геометрической точки зрения:

$(\bar{x}, \bar{x}, \ldots, \bar{x})$ — проекция вектора $\mathbf{x}$ на Span $\mathbf{v}$, где $\mathbf{v} = (1, 1, \ldots, 1)$.

$(x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \ldots, x_n - \bar{x})$ — проекция вектора $\mathbf{x}$ на Span$^{\perp}$ $\mathbf{v}$.

Выборочная дисперсия

Определение

Выборочной дисперсией набора чисел $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ называют величину $\|\mathbf{x}'\|^2/(n-1)$, где вектор $\mathbf{x}'$ — это центрированный вектор $\mathbf{x}$.

$$\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{n-1}.$$

Выборочная дисперсия

Определение

Выборочной дисперсией набора чисел $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ называют величину $\|\mathbf{x}'\|^2/(n-1)$, где вектор $\mathbf{x}'$ — это центрированный вектор $\mathbf{x}$.

$$\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{n-1}.$$

Выборочная дисперсия вектора показывает «разброс» x_i, насколько далеки x_i от своего среднего $\bar{x}$.

Стандартное отклонение

Если x_i измеряется в сантиментрах, то выборочная дисперсия измеряется в квадратных сантиметрах.

Стандартное отклонение

Если x_i измеряется в сантиментрах, то выборочная дисперсия измеряется в квадратных сантиметрах.

Определение

Выборочным стандартным отклонением набора $\mathbf{x}$ называется корень из выборочной дисперсии

$$sd(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{n-1}}.$$

Стандартное отклонение

Если x_i измеряется в сантиментрах, то выборочная дисперсия измеряется в квадратных сантиметрах.

Определение

Выборочным стандартным отклонением набора $\mathbf{x}$ называется корень из выборочной дисперсии

$$sd(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{n-1}}.$$

Стандартное отклонение

Если x_i измеряется в сантиментрах, то выборочная дисперсия измеряется в квадратных сантиметрах.

Определение

Выборочным стандартным отклонением набора $\mathbf{x}$ называется корень из выборочной дисперсии

$$sd(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}{n-1}}.$$

Если x_i измеряется в сантиментрах, то выборочное стандартное отклонение измеряется в сантиметрах.

Стандартизация

Популярным вариантом масштабирования переменной является переход к безразмерной величине по принципу:

$$x_i \to \frac{x_i - \bar{x}}{sd(\mathbf{x})}.$$

Стандартизация

Популярным вариантом масштабирования переменной является переход к безразмерной величине по принципу:

$$x_i \to \frac{x_i - \bar{x}}{sd(\mathbf{x})}.$$

После стандартизации величина имеет нулевое среднее и единичное стандартное отлонение.

Выборочная корреляция

Определение

Выборочной корреляцией двух наборов чисел $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ называют косинус угла между их центрированными версиями:

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \cos\angle(\mathbf{x}', \mathbf{y}') = \frac{\langle \mathbf{x}', \mathbf{y}' \rangle}{\|\mathbf{x}'\| \|\mathbf{y}'\|},$$

где $x_i' = x_i - \bar{x}$ и $y_i' = y_i - \bar{y}$.

Выборочная корреляция

Определение

Выборочной корреляцией двух наборов чисел $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ называют косинус угла между их центрированными версиями:

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \cos \angle(\mathbf{x}', \mathbf{y}') = \frac{\langle \mathbf{x}', \mathbf{y}' \rangle}{\|\mathbf{x}'\| \|\mathbf{y}'\|},$$

где $x_i' = x_i - \bar{x}$ и $y_i' = y_i - \bar{y}$.

Не определена, если $\mathbf{x}$ или $\mathbf{y}$ состоит из одинаковых чисел.

Выборочная корреляция

Определение

Выборочной корреляцией двух наборов чисел $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ называют косинус угла между их центрированными версиями:

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \cos \angle(\mathbf{x}', \mathbf{y}') = \frac{\langle \mathbf{x}', \mathbf{y}' \rangle}{\|\mathbf{x}'\| \|\mathbf{y}'\|},$$

где $x_i' = x_i - \bar{x}$ и $y_i' = y_i - \bar{y}$.

Не определена, если $\mathbf{x}$ или $\mathbf{y}$ состоит из одинаковых чисел.

Лежит в диапазоне от -1 до 1.

Выборочная корреляция

Утверждение

Выборочная корреляция равна

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})}}.$$

Если после центрирования векторы ортогональны, то выборочная корреляция равна 0.

Выборочная корреляция

Утверждение

Выборочная корреляция равна

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})}}.$$

Если после центрирования векторы ортогональны, то выборочная корреляция равна 0.

Не чувствительна к масштабированию.

Выборочная корреляционная матрица

Определение

Выборочной корреляционной матрицей переменных $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$, $\ldots$, $\mathbf{x}_k$ называется матрица C, элементами которой являются выборочные корреляции,

$$c_{ij} = \rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

Выборочная корреляционная матрица

Определение

Выборочной корреляционной матрицей переменных $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ называется матрица C, элементами которой являются выборочные корреляции,

$$c_{ij} = \rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

Если переменные $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ стандартизированы, то $C = X^T X$.

Выборочная корреляционная матрица

Определение

Выборочной корреляционной матрицей переменных $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ называется матрица C, элементами которой являются выборочные корреляции,

$$c_{ij} = \rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

Если переменные $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ стандартизированы, то $C = X^T X$.

Матрица C симметрична и положительно полуопределена.

PCA: максимизация разброса

Краткий план:

- Последовательное построение компонент.

Краткий план:

- Последовательное построение компонент.
- Свойства компонент.

Метод главных компонент

Есть матрица X исходных наблюдений:

наблюдения отложены по строкам, а переменные — по столбцам.

Метод главных компонент

Есть матрица X исходных наблюдений:

наблюдения отложены по строкам, а переменные — по столбцам.

Переменных очень много.

Метод главных компонент

Есть матрица X исходных наблюдений:

наблюдения отложены по строкам, а переменные — по столбцам.

Переменных очень много.

А мы хотим визуализировать данные.

Метод главных компонент

Есть матрица X исходных наблюдений:

наблюдения отложены по строкам, а переменные — по столбцам.

Переменных очень много.

А мы хотим визуализировать данные.

Или хотим иметь небольшое количество переменных, которые бы почти без потерь содержали всю информацию в исходных переменных.

Метод главных компонент

Все исходные переменные предварительно стандартизируем!

Метод главных компонент

Все исходные переменные предварительно стандартизируем!

Для каждого столбца $\mathbf{x}$ выполнены условия $\bar{x} = 0$, $sd(\mathbf{x}) = 1$.

Метод главных компонент

Все исходные переменные предварительно стандартизируем!

Для каждого столбца $\mathbf{x}$ выполнены условия $\bar{x} = 0$, $sd(\mathbf{x}) = 1$.

На базе столбцов $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ матрицы X мы создадим $d \leq k$ новых переменных $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$.

Метод главных компонент

Все исходные переменные предварительно стандартизируем!

Для каждого столбца $\mathbf{x}$ выполнены условия $\bar{x} = 0$, $sd(\mathbf{x}) = 1$.

На базе столбцов $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ матрицы X мы создадим $d \leq k$ новых переменных $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$.

Новые переменные будем создавать по-очереди.

Метод главных компонент

Все исходные переменные предварительно стандартизируем!

Для каждого столбца $\mathbf{x}$ выполнены условия $\bar{x} = 0$, $sd(\mathbf{x}) = 1$.

На базе столбцов $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$, …, $\mathbf{x}_k$ матрицы X мы создадим $d \leq k$ новых переменных $\mathbf{p}_1$, $\mathbf{p}_2$, …, $\mathbf{p}_d$.

Новые переменные будем создавать по-очереди.

Новые переменные будем называть главными компонентами.

PCA — principal component analysis.

Максимизация разброса

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Максимизация разброса

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Алгоритм

1. Компоненту $\mathbf{p}_1 = X\mathbf{v}_1$ подберём так, чтобы выборочная дисперсия $\mathbf{p}_1$ была максимальной при условии, что $\|\mathbf{v}_1\| = 1$.

Максимизация разброса

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Алгоритм

1. Компоненту $\mathbf{p}_1 = X\mathbf{v}_1$ подберём так, чтобы выборочная дисперсия $\mathbf{p}_1$ была максимальной при условии, что $\|\mathbf{v}_1\| = 1$.
2. Компоненту $\mathbf{p}_2 = X\mathbf{v}_2$ подберём так, чтобы выборочная дисперсия $\mathbf{p}_2$ была максимальной при условии, что $\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{v}_1$ и $\|\mathbf{v}_2\| = 1$.

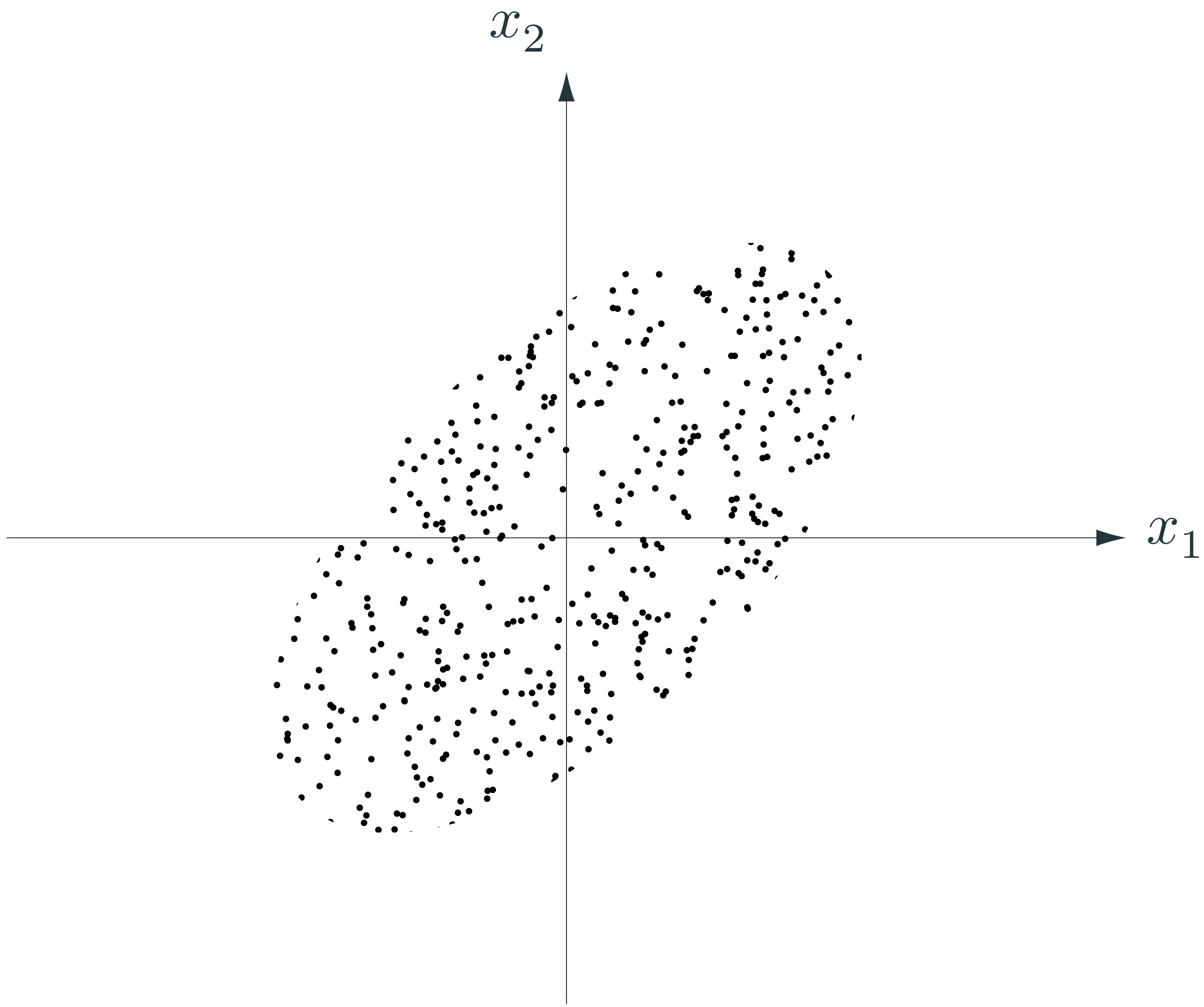
Максимизация разброса

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

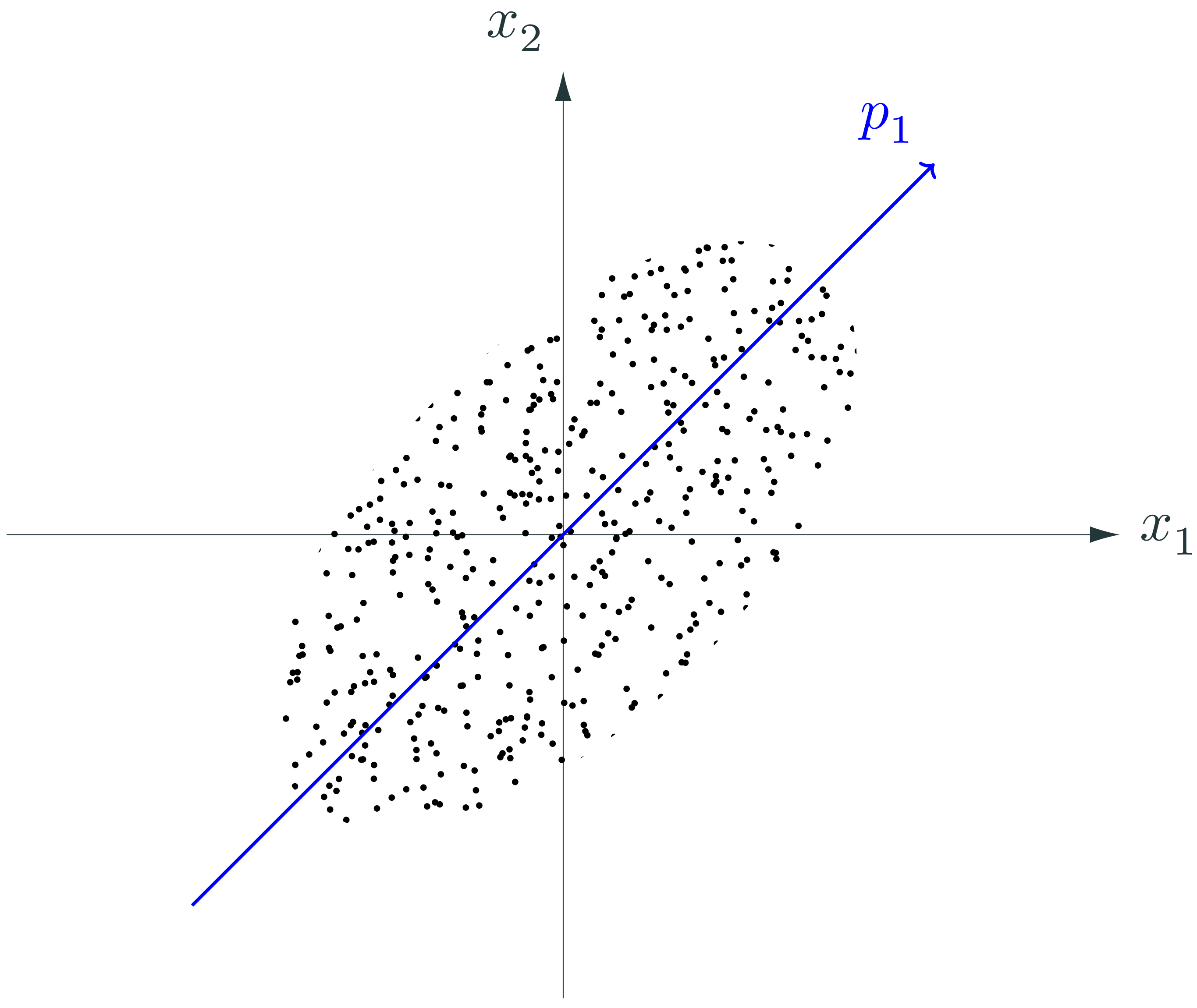
Алгоритм

1. Компоненту $\mathbf{p}_1 = X\mathbf{v}_1$ подберём так, чтобы выборочная дисперсия $\mathbf{p}_1$ была максимальной при условии, что $\|\mathbf{v}_1\| = 1$.
2. Компоненту $\mathbf{p}_2 = X\mathbf{v}_2$ подберём так, чтобы выборочная дисперсия $\mathbf{p}_2$ была максимальной при условии, что $\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{v}_1$ и $\|\mathbf{v}_2\| = 1$.
3. Компоненту $\mathbf{p}_3 = X\mathbf{v}_3$ подберём так, чтобы выборочная дисперсия $\mathbf{p}_3$ была максимальной при условии, что $\mathbf{v}_3 \perp \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_1$ и $\|\mathbf{v}_3\| = 1$.
4. …

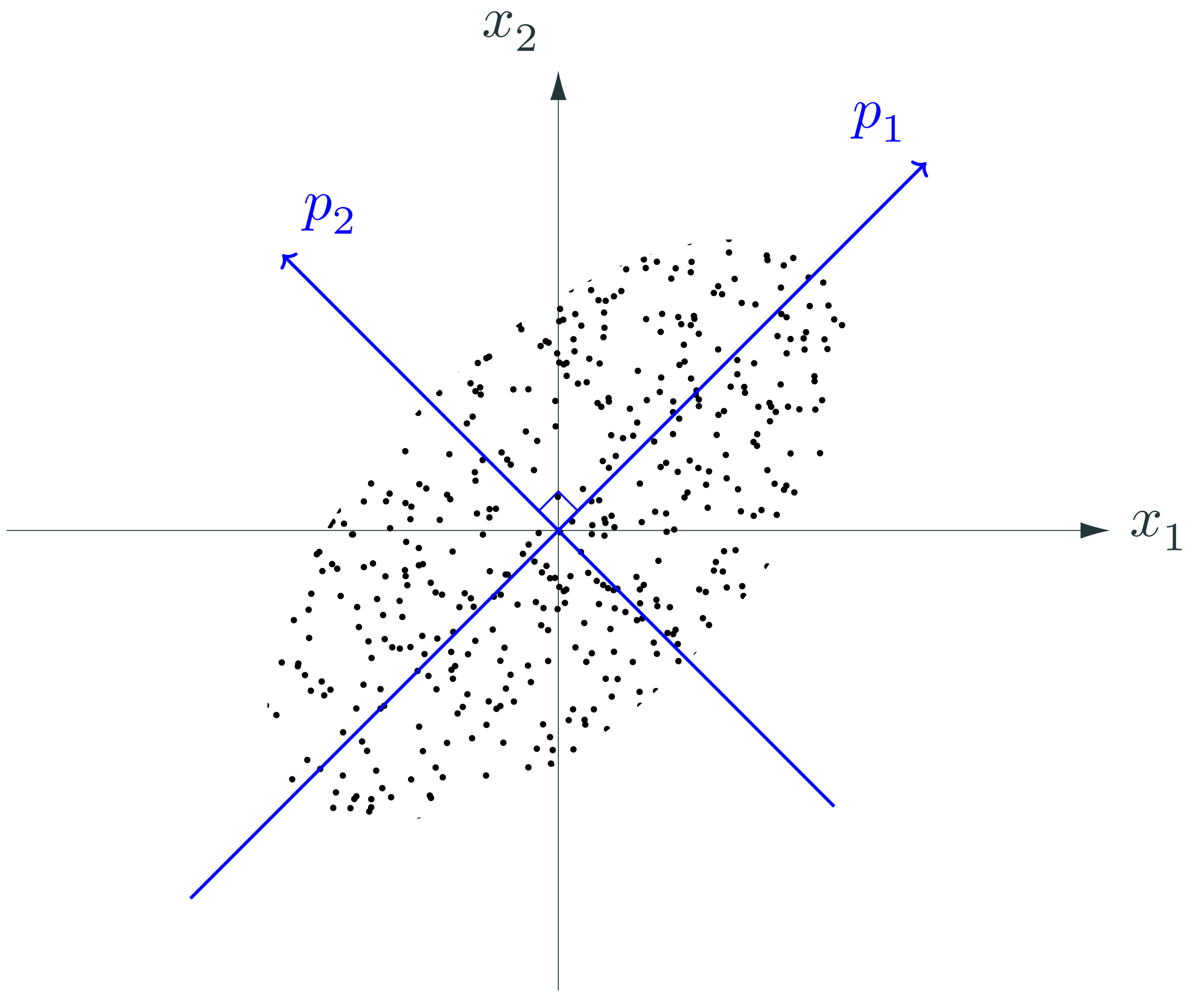
Картинка



Картинка



Картинка



Это завуалированный SVD!

Если $X = U\Sigma V^T$, то $P = XV = U\Sigma$.

Это завуалированный SVD!

Если $X = U\Sigma V^T$, то $P = XV = U\Sigma$.

$$\begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{p}_1 & \dots & \mathbf{p}_k \\ | & & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{x}_1 & \dots & \mathbf{x}_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_k \\ | & & | \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{p}_1 & \dots & \mathbf{p}_k \\ | & & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{u}_1 & \dots & \mathbf{u}_n \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_k \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Это завуалированный SVD!

Если $X = U\Sigma V^T$, то $P = XV = U\Sigma$.

$$\begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{p}_1 & \ldots & \mathbf{p}_k \\ | & & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{x}_1 & \ldots & \mathbf{x}_k \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{v}_1 & \ldots & \mathbf{v}_k \\ | & & | \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{p}_1 & \ldots & \mathbf{p}_k \\ | & & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & & | \\ \mathbf{u}_1 & \ldots & \mathbf{u}_n \\ | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \sigma_k \\ 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 0 \end{pmatrix}$$

Свойства

Главные компоненты находятся из SVD разложения, $\mathbf{p}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$.

Свойства

Главные компоненты находятся из SVD разложения, $\mathbf{p}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$.

Главные компоненты ортогональны.

Величины σ_i^2 равны квадратам длин $\|\mathbf{p}_i\|^2$ и пропорциональны выборочным дисперсиям $\mathbf{p}_i$.

Достигаемое значение максимума суммы

$$\|\mathbf{p}_1\|^2 + \|\mathbf{p}_2\|^2 + \ldots + \|\mathbf{p}_k\|^2$$

одинаковое при пошаговой и одновременной максимизации.

Связь с корреляционной матрицей

Если $X = U\Sigma V^T$, то корреляционная матрица имеет вид $C = X^T X = V\Sigma^T \Sigma V^T$.

Связь с корреляционной матрицей

Если $X = U\Sigma V^T$, то корреляционная матрица имеет вид $C = X^T X = V\Sigma^T\Sigma V^T$.

Векторы весов $\mathbf{v}_i$, с которыми исходные переменные входят в компоненты, являются собственными векторами корреляционной матрицы C.

Связь с корреляционной матрицей

Если $X = U\Sigma V^T$, то корреляционная матрица имеет вид $C = X^T X = V\Sigma^T \Sigma V^T$.

Векторы весов $\mathbf{v}_i$, с которыми исходные переменные входят в компоненты, являются собственными векторами корреляционной матрицы C.

Сингулярные значения матрицы X в квадрате являются собственными числами корреляционной матрицы C, $\lambda_i = \sigma_i^2$.

PCA: минимизация ошибки

Краткий план:

- Последовательное построение компонент.

Краткий план:

- Последовательное построение компонент.
- Свойства компонент.

Метод главных компонент

Есть матрица X исходных наблюдений:

наблюдения отложены по строкам, а переменные — по столбцам.

Переменных очень много.

А мы хотим визуализировать данные.

Или хотим иметь небольшое количество переменных, которые бы почти без потерь содержали всю информацию в исходных переменных.

Поиск наилучшего приближения

Хотим найти матрицу $\hat{X}$ такую, чтобы при заданном ранге rank $\hat{X} = d$ матрица $\hat{X}$ была бы поближе к X:

$$\sum_{ij} (x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 = \operatorname{tr}((X - \hat{X})^T (X - \hat{X})) \to \min$$

Поиск наилучшего приближения

Хотим найти матрицу $\hat{X}$ такую, чтобы при заданном ранге $\operatorname{rank} \hat{X} = d$ матрица $\hat{X}$ была бы поближе к X:

$$\sum_{ij} (x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 = \operatorname{tr}((X - \hat{X})^T (X - \hat{X})) \to \min$$

Аппроксимация с рангом d обозначим $\hat{X}_d$.

Метод главных компонент

Все исходные переменные предварительно стандартизируем!

Для каждого столбца $\mathbf{x}$ выполнены условия $\bar{x} = 0$, $sd(\mathbf{x}) = 1$.

На базе столбцов $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_k$ матрицы X мы создадим $d \leq k$ новых переменных $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$.

Новые переменные будем создавать по-очереди.

Новые переменные будем называть главными компонентами.

PCA — principal component analysis.

Минимизация ошибки приближения

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Минимизация ошибки приближения

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Матрица $\hat{X}_i$ содержит проекции столбцов матрицы X на Span$\{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_i\}$.

Алгоритм

1. Компоненту $\mathbf{p}_1 = X\mathbf{v}_1$ подберём так, чтобы матрица $\hat{X}_1$ была наилучшей аппроксимацией X, $\sum_{ij}(x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 \to$ min.

Минимизация ошибки приближения

Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Матрица $\hat{X}_i$ содержит проекции столбцов матрицы X на Span$\{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_i\}$.

Алгоритм

1. Компоненту $\mathbf{p}_1 = X\mathbf{v}_1$ подберём так, чтобы матрица $\hat{X}_1$ была наилучшей аппроксимацией X, $\sum_{ij}(x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 \to$ min.
2. Компоненту $\mathbf{p}_2 = X\mathbf{v}_2$ подберём так, чтобы матрица $\hat{X}_2$ была наилучшей аппроксимацией X, $\sum_{ij}(x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 \to$ min при условии, что $\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{v}_1$ и $\|\mathbf{v}_2\| = 1$.

Минимизация ошибки приближения

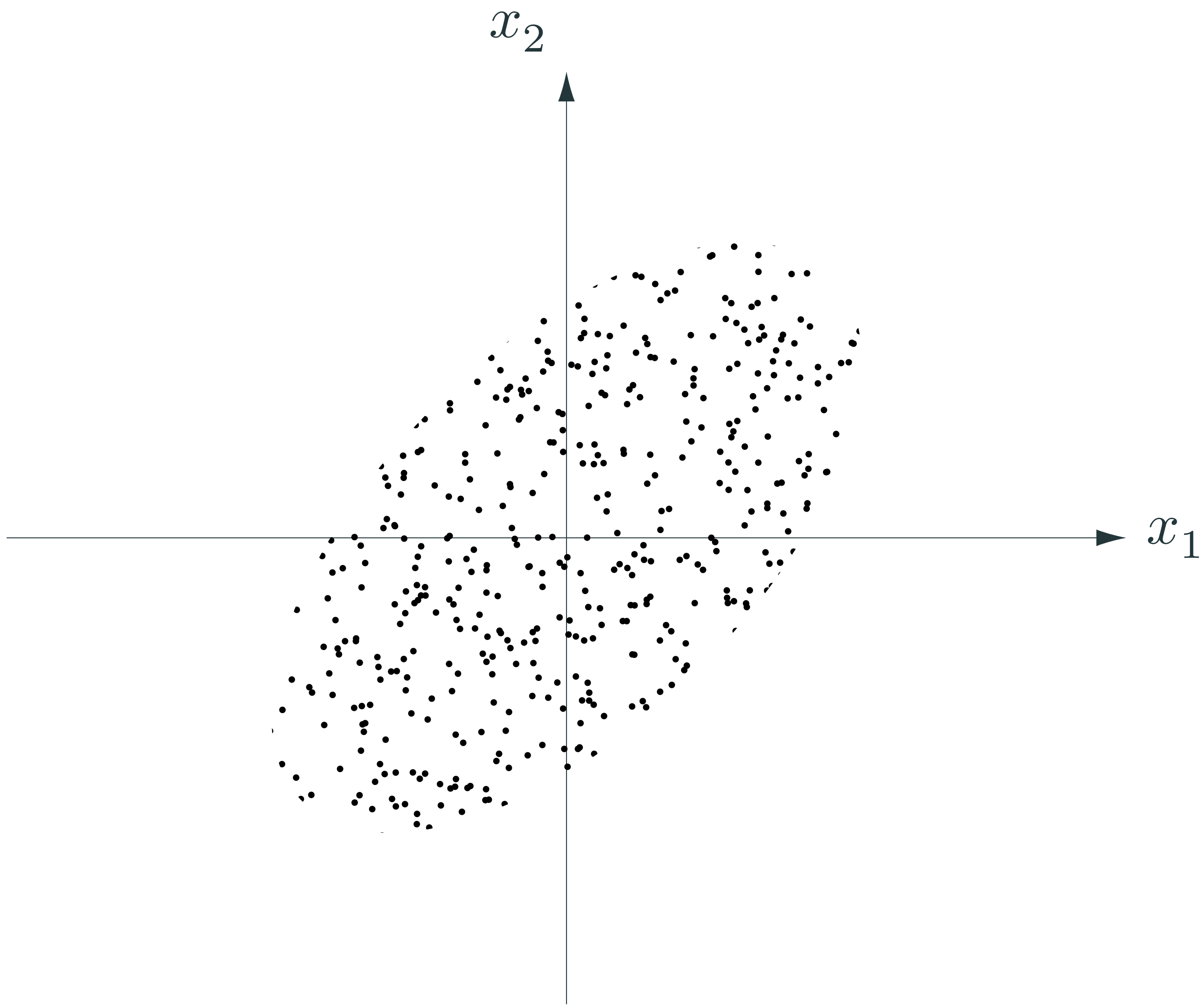
Главные компоненты $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_d$ будут линейными комбинациями столбцов X.

Матрица $\hat{X}_i$ содержит проекции столбцов матрицы X на Span$\{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots, \mathbf{p}_i\}$.

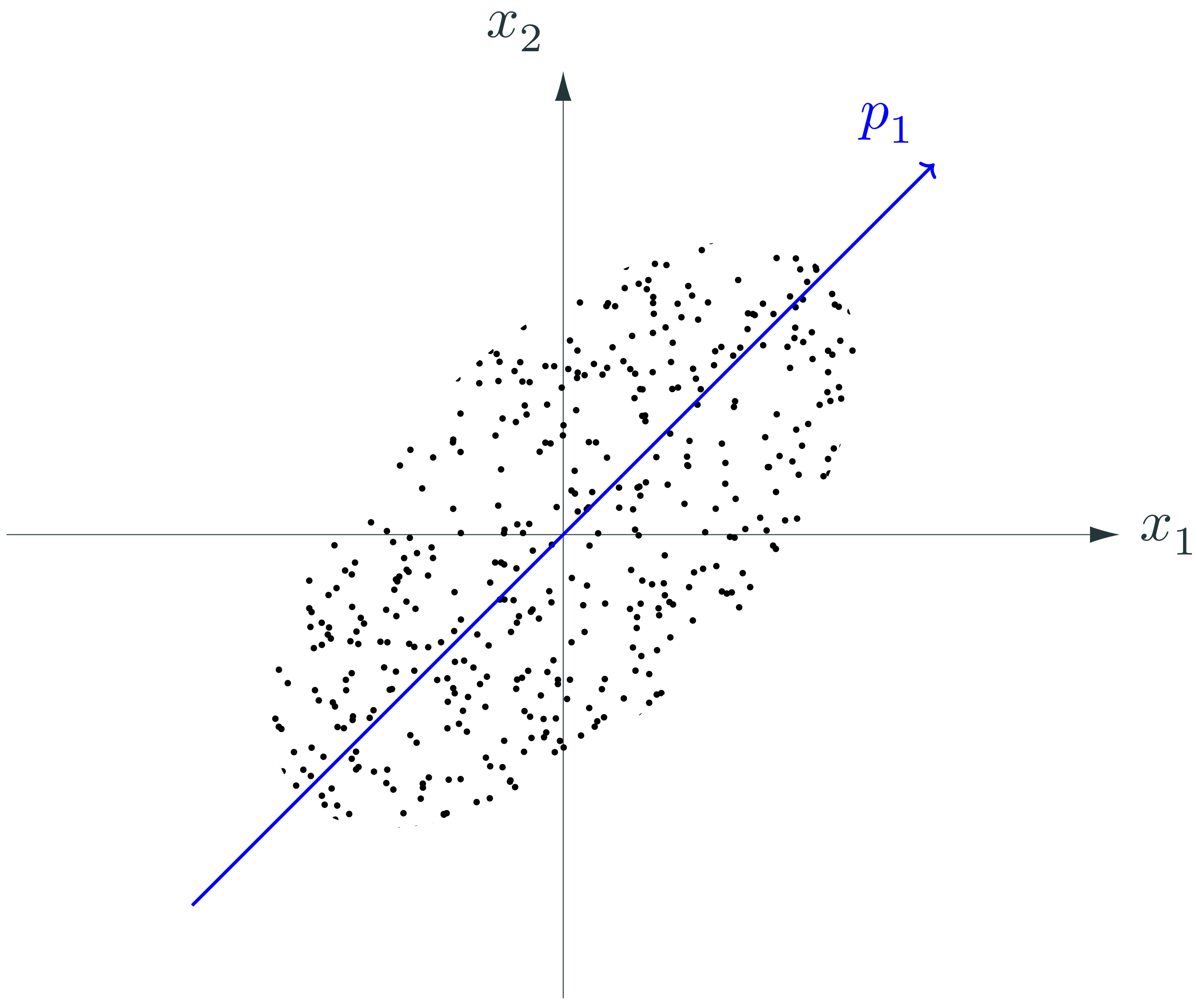
Алгоритм

1. Компоненту $\mathbf{p}_1 = X\mathbf{v}_1$ подберём так, чтобы матрица $\hat{X}_1$ была наилучшей аппроксимацией X, $\sum_{ij}(x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 \to$ min.
2. Компоненту $\mathbf{p}_2 = X\mathbf{v}_2$ подберём так, чтобы матрица $\hat{X}_2$ была наилучшей аппроксимацией X, $\sum_{ij}(x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 \to$ min при условии, что $\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{v}_1$ и $\|\mathbf{v}_2\| = 1$.
3. …

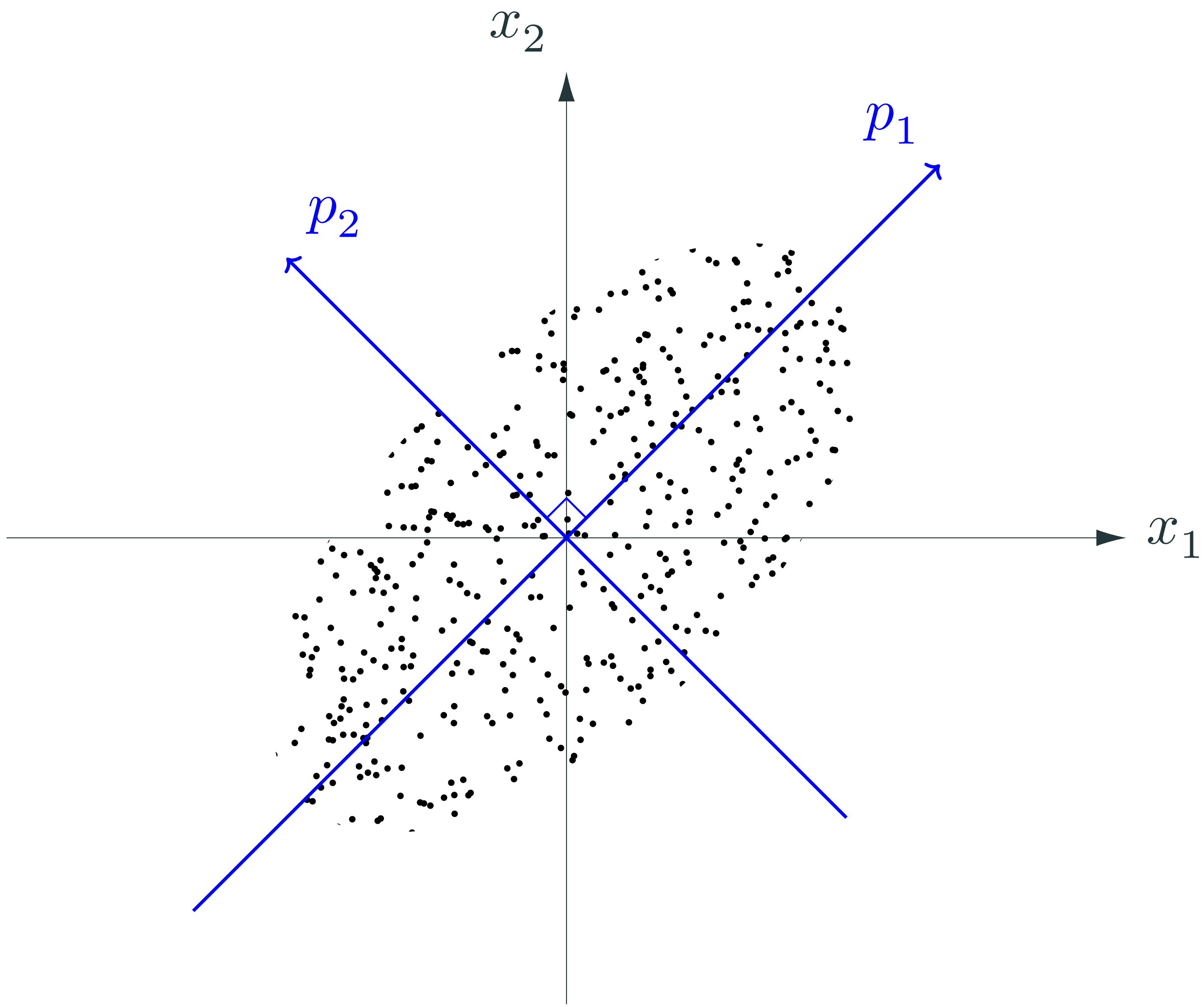
Картинка



Картинка



Картинка



И это завуалированный SVD!

Если $X = U\Sigma V^T$, то $P = XV = U\Sigma$.

И это завуалированный SVD!

Если $X = U\Sigma V^T$, то $P = XV = U\Sigma$.

Аппроксимация $\hat{X}_d$ с рангом rank $\hat{X}_d = d$ строится так:

$$\hat{X}_d = U\Sigma_d V^T,$$

где матрицу Σ_d получили из матрицы Σ оставив в ней только d штук самых больших сингулярных значений и занулив остальные.

Свойства

Главные компоненты находятся из SVD разложения, $\mathbf{p}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$.

Главные компоненты ортогональны.

Величины σ_i^2 равны квадратам длин $\|\mathbf{p}_i\|^2$ и пропорциональны выборочным дисперсиям $\mathbf{p}_i$.

Свойства

Главные компоненты находятся из SVD разложения, $\mathbf{p}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$.

Главные компоненты ортогональны.

Величины σ_i^2 равны квадратам длин $\|\mathbf{p}_i\|^2$ и пропорциональны выборочным дисперсиям $\mathbf{p}_i$.

Значение максимума суммы

$$\|\mathbf{p}_1\|^2 + \|\mathbf{p}_2\|^2 + \ldots + \|\mathbf{p}_k\|^2$$

одинаковое при пошаговой и одновременной максимизации.

Скринкаст: SVD для снижения размерности

Это видеофрагмент с доской, слайдов здесь нет :)

Бонус: геометрическая алгебра

Это видеофрагмент с доской, слайдов здесь нет :)