Семинары по методу главных компонент

Евгений Соколов
sokolov.evg@gmail.com

15 апреля 2016 г.

1 Метод главных компонент

В машинном обучении часто возникает задача уменьшения размерности признакового пространства. Одним из подходов к ее решению является поиск новых признаков, каждый из которых является линейной комбинацией исходных признаков. В случае использования квадратичной функции ошибки при поиске такого приближения получается *метод главных компонент* (principal component analysis, PCA), о котором и пойдет речь.

§1.1 Векторное дифференцирование

Выведем некоторые формулы векторного дифференцирования, которые понадобятся нам в дальнейшем.

Следом квадратной матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A = (a_{ij})_{i,j=1}^{n}$ называется сумма ее диагональных элементов:

$$\operatorname{tr} A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}.$$

Нормой Фробениуса матрицы $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ называется величина

$$\|A\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2}.$$

Нам пригодится следующее соотношение.

Задача 1.1. *Покажите, что*

$$\|A\|^2 = \operatorname{tr} A^T A.$$

Решение.

$$\operatorname{tr} A^T A = \sum_{i=1}^{n} (A^T A)_{ii} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{ij}^T a_{ji} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{ji}^2 = \|A\|^2.$$

■

Задача 1.2. *Покажите, что матрицы $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ и $B \in \mathbb{R}^{n\times m}$, можно переставлять под знаком следа:*

$$\operatorname{tr} AB = \operatorname{tr} BA.$$

Решение. Легко доказывается путем расписывания левой и правой частей равенства.

■

Отсюда вытекает *циклическое свойство* следа:

$$\operatorname{tr} ABC = \operatorname{tr} CAB = \operatorname{tr} BCA,$$

при условии, что размерности матриц допускают такие перестановки.

Пусть $f : \mathbb{R}^{m\times n} \to \mathbb{R}$ — вещественнозначная функция, заданная на пространстве матриц. Производная этой функции по матрице определяется как матрица производных по отдельным элементам

$$\nabla_X f(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix}$$

Задача 1.3. *Покажите, что для матриц $X \in \mathbb{R}^{m\times n}$ и $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ выполнено*

$$\nabla_X \operatorname{tr} XA = A^T.$$

Решение. Найдем производную по x_{ij}:

$$\frac{\partial}{\partial x_{ij}} \operatorname{tr} XA = \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} x_{ij} a_{ji} = a_{ji}.$$

Получаем, что

$$\nabla_X \operatorname{tr} XA = A^T.$$

■

Задача 1.4. *Покажите, что*

$$\nabla_X \operatorname{tr} AXB = A^T B^T.$$

Решение. Пользуясь циклическим свойством и предыдущей задачей, получаем

$$\nabla_X \operatorname{tr} AXB = \nabla_X \operatorname{tr} XBA = (BA)^T = A^T B^T.$$

■

Также нам понадобится следующая формула, которую мы оставим без доказательства:

$$\nabla_X \operatorname{tr} BX^T XB^T = 2XB^T B.$$

§1.2 Метод главных компонент как матричное разложение

Пусть $X \in \mathbb{R}^{\ell \times D}$ — матрица «объекты-признаки», где ℓ — число объектов, а D — число признаков. Поставим задачу уменьшить размерность пространства до d. Новую матрицу «объекты-признаки» обозначим через $Z \in \mathbb{R}^{\ell \times d}$. Потребуем, чтобы старые признаки линейно выражались через новые:

$$x_{ij} = \sum_{s=1}^{d} z_{is} u_{js},$$

или, в векторном виде, $x_i = z_i U^T$ (здесь мы ввели матрицу перехода $U \in \mathbb{R}^{D \times d}$). Данные уравнения не могут быть выполнены точно при $d < \operatorname{rk} X$, поэтому потребуем, чтобы левая и правая части равенств были как можно ближе друг к другу с точки зрения квадратичного отклонения:

$$F = \sum_{i=1}^{\ell} \|x_i - z_i U^T\|^2 = \|X - ZU^T\|^2 \to \min_{Z,U}. \tag{1.1}$$

Таким образом, мы пришли к задаче представления матрицы X в виде произведения двух матриц меньшей размерности. Эта задача называется *задачей матричного разложения*. В данном случае мы ищем приближение, оптимальное в смысле нормы Фробениуса, однако могут использоваться и другие нормы или метрики.

Везде далее мы будем предполагать, что матрицы Z и U имеют полный ранг, потому что иначе размерность нового пространства d может быть уменьшена без потери качества.

Приступим к решению этой задачи. Перепишем функционал:

$$\begin{aligned}
F &= \|X - ZU^T\|^2 = \\
&= \operatorname{tr}(X^T - UZ^T)(X - ZU^T) = \\
&= \operatorname{tr}(X^T X) - \operatorname{tr}(X^T Z U^T) - \operatorname{tr}(U Z^T X) + \operatorname{tr}(U Z^T Z U^T) = \\
&= \{\operatorname{tr} A^T = \operatorname{tr} A\} = \\
&= \operatorname{tr}(X^T X) - 2\operatorname{tr}(X^T Z U^T) + \operatorname{tr}(U Z^T Z U^T).
\end{aligned}$$

Воспользовавшись в последнем выражении тем, что $\operatorname{tr} A^T = \operatorname{tr} A$ и $\operatorname{tr} AB = \operatorname{tr} BA$, можно получить эквивалентное представление:

$$\operatorname{tr}(X^T X) - 2\operatorname{tr}(X^T Z U^T) + \operatorname{tr}(U Z^T Z U^T) = \operatorname{tr}(X^T X) - 2\operatorname{tr}(U Z^T X) + \operatorname{tr}(Z U^T U Z^T).$$

Теперь, пользуясь выведенными выше формулами векторного дифференцирования и двумя последними представлениями функционала F, найдем его производные по Z и U и приравняем их к нулю:

$$\begin{aligned}
&-2XU + 2ZU^T U = (ZU^T - X)U = 0; \\
&-2X^T Z + 2UZ^T Z = Z^T(ZU^T - X) = 0.
\end{aligned}$$

Пользуясь тем фактом, что матрицы Z и U имеют полный ранг, получаем

$$\begin{cases} Z = XU(U^T U)^{-1}; \\ U = X^T Z(Z^T Z)^{-1}. \end{cases} \tag{1.2}$$

Заметим, что данные решения не позволяют найти решение в явном виде. Это логично, поскольку задача (1.1) не имеет единственного решения: если пара (Z, U) является решением, то решением является и пара (ZR, UR^{-T}) [1] для любой невырожденной матрицы R. Чтобы преодолеть эту проблему, наложим на решение дополнительное ограничение: матрицы $Z^T Z$ и $U^T U$ должны быть диагональными.

Пусть $(\tilde{Z}, \tilde{U})$ — произвольное решение задачи (1.1). Матрица $\tilde{U}^T\tilde{U}$ невырожденная (как произведение невырожденных матриц) и симметричная, поэтому существует такая невырожденная матрица S, что

$$S^{-1}\tilde{U}^T\tilde{U}S^{-T} = I.$$

Матрица $S^T\tilde{Z}^T\tilde{Z}S$ невырожденная и симметричная, поэтому существует такая ортогональная матрица T, $T^T T = TT^T = I$, что

$$T^T(S^T\tilde{Z}^T\tilde{Z}S)T = \Lambda,$$

где $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_d)$ — диагональная матрица.

Возьмем $R = ST$ и рассмотрим решение $(Z, U) = (\tilde{Z}R, \tilde{U}R^{-T})$. Тогда:

$$Z^T Z = R^T\tilde{Z}^T\tilde{Z}R = T^T S^T\tilde{Z}^T\tilde{Z}ST = \Lambda;$$
$$U^T U = R^{-1}\tilde{U}^T\tilde{U}R^{-T} = T^{-1}\underbrace{S^{-1}\tilde{U}^T\tilde{U}S^{-T}}_{I}T^{-T} = T^{-1}T^{-T} = (TT^T)^{-1} = I.$$

Таким образом, мы нашли такое решение, что матрицы $U^T U$ и $Z^T Z$ являются диагональными. Учтем это в уравнениях (1.2):

$$\begin{cases} Z = XU; & (1.3)\\ U\Lambda = X^T Z. & (1.4)\end{cases}$$

Подставляя (1.3) в (1.4), получаем уравнение

$$U\Lambda = X^T XU.$$

Это означает, что столбцы матрицы U являются собственными векторами матрицы $X^T X$, и соответствующими им собственными значениями являются числа $\lambda_1, \ldots, \lambda_d$, стоящие на диагонали матрицы Λ.

Подставим теперь уравнение (1.4) в (1.3):

$$Z\Lambda = XX^T Z.$$

Это означает, что столбцы матрицы Z являются собственными векторами матрицы XX^T, и им соответствуют собственные значения $\lambda_1, \ldots, \lambda_d$.

[1] Здесь под S^{-T} мы понимаем $(S^T)^{-1} = (S^{-1})^T$.

Подставим матрицы U и Z в функционал (1.1):

$$\begin{aligned}
F &= \|X - ZU^T\|^2 = \mathrm{tr}(X^T - UZ^T)(X - ZU^T) = \\
&= \mathrm{tr}\, X^T(X - ZU^T) - \mathrm{tr}(UZ^T X - UZ^T ZU^T) = \\
&= \{(1.4) \Rightarrow Z^T X = \Lambda U^T, Z^T Z = \Lambda\} = \\
&= \mathrm{tr}\, X^T(X - ZU^T) - \mathrm{tr}(\underbrace{U\Lambda U^T - U\Lambda U^T}_{=0}) = \\
&= \mathrm{tr}\, X^T(X - ZU^T) = \\
&= \mathrm{tr}\, X^T X - \mathrm{tr}\, X^T Z U^T = \{(1.4) \Rightarrow X^T Z = U\Lambda\} = \\
&= \mathrm{tr}\, X^T X - \mathrm{tr}\, U\Lambda U^T = \\
&= \mathrm{tr}\, X^T X - \mathrm{tr}\, \Lambda \underbrace{U^T U}_{=I} = \\
&= \{\text{след матрицы равен сумме ее собственных значений}\} = \\
&= \sum_{i=1}^{D} \lambda_i - \sum_{i=1}^{d} \lambda_i = \\
&= \sum_{i=d+1}^{D} \lambda_i.
\end{aligned}$$

В предпоследнем равенстве мы воспользовались тем, что $\{\lambda_i\}$ — собственные значения матрицы $X^T X$. Из последнего равенства заключаем, что минимум функционала (1.1) достигается, если матрица Λ состоит из d наибольших собственных значений матрицы $X^T X$.

Получаем следующий алгоритм для нахождения новых d признаков, линейно зависящих от исходных:

1. Найти собственное разложение матрицы $X^T X$:

   $$X^T X = Q\Lambda Q^T;$$

2. Построить матрицу U, столбцы которой — собственные векторы, соответствующие d наибольшим собственным значениям из Λ;

3. Перейти к новой матрице признаков, пользуясь уравнением (1.3):

   $$Z = XU.$$

1.2.1 Метод главных компонент как поиск проекционной плоскости

Рассмотрим иной подход к поиску новых признаков: найдем такую d-мерную плоскость в признаковом пространстве, что ошибка проецирования обучающих объектов на нее будет минимальной.

Будем искать направляющие векторы плоскости $u_1, \ldots, u_d$. Если они представляют собой ортонормированную систему, то проекция z вектора x на определяемую ими плоскость находится по формуле $z = xU$. Ошибка проецирования на плоскость определяется как норма разности между исходным вектором x и его проекцией z.

По теореме Пифагора [2] эта ошибка равна $\|x\|^2 - \|z\|^2$ [3] Ошибка проецирования всей выборке записывается как

$$\sum_{i=1}^{\ell} \|x_i\|^2 - \sum_{i=1}^{\ell} \|x_i U\|^2 = \sum_{i=1}^{\ell} \|x_i\|^2 - \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{d} \langle u_j, x_i \rangle^2 =$$
$$= \sum_{i=1}^{\ell} \|x_i\|^2 - \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{d} u_j^T x_i x_i^T u_j = \sum_{i=1}^{\ell} \|x_i\|^2 - \sum_{j=1}^{d} u_j^T \left(\sum_{i=1}^{\ell} x_i x_i^T \right) u_j.$$

Матрица $S = \sum_{i=1}^{\ell} x_i x_i^T$ называется *выборочной матрицей ковариации.* Заметим, что от $\{u_j\}$ зависит лишь второе слагаемое. Получаем, что поиск плоскости с минимальной ошибкой проецирования сводится к следующей задаче оптимизации:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{d} u_j^T S u_j \to \max \\ \|u_j\|^2 = 1, \quad j = 1, \dots, d. \end{cases} \tag{1.5}$$

Мы не включили в эту задачу условие, что система векторов $u_1, \dots, u_d$ должна быть ортогональной, оставив лишь условия на нормировку. Позже мы увидим, что полученное нами решение все равно будет представлять собой ортонормированную систему.

Выпишем лагранжиан задачи (1.5):

$$L = \sum_{j=1}^{d} u_j^T S u_j + \sum_{j=1}^{d} \lambda_j (1 - \|u_j\|^2).$$

Дифференцируя его и приравнивая к нулю, получаем

$$\nabla_{u_j} L = 2 S u_j - 2 \lambda_j u_j = 0 \quad \Rightarrow \quad S u_j = \lambda_j u_j.$$

Отсюда следует, что векторы u_j являются собственными векторами матрицы $S = X^T X$, а двойственные переменные λ_j — соответствующими им собственными значениями. Собственные векторы симметричной матрицы всегда определены с точностью до скалярного множителя, поэтому их всегда можно выбрать такими, что $\|u_j\|^2 = 1$. Подставим их в функционал задачи (1.5):

$$\sum_{j=1}^{d} u_j^T S u_j = \sum_{j=1}^{d} \lambda_j \underbrace{u_j^T u_j}_{=1} = \sum_{j=1}^{d} \lambda_j.$$

Таким образом, функционал достигнет своего максимума, если взять в качестве $\{u_j\}$ собственные векторы матрицы S, соответствующие ее наибольшим d собственным значениям. Из линейной алгебры известно, что различные собственные векторы симметричной матрицы ортогональны друг другу, поэтому система $\{u_j\}$ будет ортонормированной. Новые признаковые описания объектов находятся путем проецирования объектов на полученную плоскость: $Z = XU$.

[2] Если векторы v_1 и v_2 ортогональны, то $\|v_1 + v_2\|^2 = \|v_1\|^2 + \|v_2\|^2$.

[3] Строго говоря, неправильно говорить о разности между векторами x и z, поскольку они имеют разные размерности (D и d соответственно). Правильнее было бы дополнить векторы $u_1, \dots, u_d$ до ортонормированного базиса и перевести вектор x в этот базис, получив вектор x_u. Его норма не изменилась бы, поскольку ортогональное преобразование сохраняет длину. Вектор z при этом следовало бы рассматривать как D-мерный, у которого координаты с $d+1$ по D равны нулю.