

SVD

Nicolas Verzelen, Joseph Salmon

INRA / Université de Montpellier



Plan

Algèbre linéaire

SVD

Pseudo-inverse

L'approche SVD pour les moindres carrés

La décomposition spectrale

Théorème spectral

Une matrice symétrique $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est diagonalisable en base orthonormée, *i.e.*, il existe $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$ et une matrice orthogonale $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ telle que :

$$S = U \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) U^\top \text{ ou } SU = U \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

Rem: Si l'on écrit $U = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n]$ cela signifie que :

$$S = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top, \quad \text{avec } \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \quad S \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i$$

Rappel : une matrice $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est dite orthogonale si elle vérifie $U^\top U = U U^\top = \operatorname{Id}_n$ ou $\forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2 \mathbf{u}_i^\top \mathbf{u}_j = \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{i,j}$

Vocabulaire : les λ_i sont les **valeurs propres** de S et les $\mathbf{u}_i \in \mathbb{R}^n$ sont les **vecteurs propres** associés

La décomposition en valeurs singulières (: *Singular Value Decomposition, SVD*)

Théorème

Pour toute matrice $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$, il existe une matrice orthogonale $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ et une matrice orthogonale $V \in \mathbb{R}^{p \times p}$, telles que

$$U^{\top} X V = \text{diag}(s_1, \dots, s_{\min(n,p)}) = \Sigma \in \mathbb{R}^{n \times p}$$

avec $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_{\min(n,p)} \geq 0$, ou encore :

$$X = U \Sigma V^{\top}$$

avec $U = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n]$ et $V = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p]$

Rappel :
$$\begin{cases} \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{i,j}, & \forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2 \\ \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j \rangle = \delta_{i,j}, & \forall (i, j) \in \llbracket 1, p \rrbracket^2 \end{cases}$$

Démonstration : diagonaliser $X^{\top} X$ Golub et Van Loan (1996)

SVD : visualisation

The diagram illustrates the SVD decomposition of a matrix X into three components: U , Σ , and V^T .

Matrix X is a rectangle with height n and width p .

Matrix U is a rectangle with height n and width n .

Matrix Σ is a rectangle with height n and width p . It contains the singular values s_1, \dots, s_n along its main diagonal, with a large 0 indicating that all other elements are zero.

Matrix V^T is a rectangle with height n and width p .

The decomposition is shown as:

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

SVD : visualisation

The diagram illustrates the SVD decomposition of a matrix X into three matrices: U , Σ , and V^T .

Matrix X is a rectangle with height n and width p .

Matrix U is a square with height n and width n .

Matrix Σ is a rectangle with height n and width p . It contains the singular values s_1, \dots, s_p along its diagonal and a large 0 in the bottom right corner, indicating that the remaining elements are zero.

Matrix V^T is a square with height p and width p .

The decomposition is shown as:

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

SVD la suite

Vocabulaire : les s_j sont les **valeurs singulières** de X ; les \mathbf{u}_j (resp. \mathbf{v}_j) sont les **vecteurs singuliers** à gauche (resp. droite)

Propriété variationnelle de la plus grande valeur singulière

$$s_1 = \begin{cases} \max_{\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^p} \mathbf{u}^\top X \mathbf{v} \\ \text{s.c. } \|\mathbf{u}\|^2 = 1 \text{ et } \|\mathbf{v}\|^2 = 1 \end{cases}$$

Lagrangien : $\mathcal{L}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^\top X \mathbf{v} - \lambda_1(\|\mathbf{u}\|^2 - 1) - \lambda_2(\|\mathbf{v}\|^2 - 1)$

$$\text{CNO : } \begin{cases} \nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{L} = X \mathbf{v} - 2\lambda_1 \mathbf{u} = 0 \\ \nabla_{\mathbf{v}} \mathcal{L} = X^\top \mathbf{u} - 2\lambda_2 \mathbf{v} = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} X \mathbf{v} = 2\lambda_1 \mathbf{u} \\ X^\top \mathbf{u} = 2\lambda_2 \mathbf{v} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} X^\top X \mathbf{v} = \alpha \mathbf{v} \\ X X^\top \mathbf{u} = \alpha \mathbf{u} \end{cases}$$

avec $\alpha = 4\lambda_1\lambda_2$, et donc \mathbf{v} et \mathbf{u} sont des vecteurs propres de $X^\top X$ et de XX^\top

SVD réduite

On part de la SVD $X = U\Sigma V^\top$

SVD réduite

On ne garde que les éléments utiles avec $r = \min(n, p)$:

$$X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top = U_r \text{diag}(s_1, \dots, s_r) V_r^\top$$

avec $s_i > 0, \forall i \in \llbracket 1, r \rrbracket$ et $U_r = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r], V_r = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r]$

Rem: Quand on en garde que les $r = \text{rang}(X)$ valeurs singulières non-nulles, on parle alors de **SVD compacte**.

Rem: les matrices $\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ sont toutes de rang 1

Rem: les \mathbf{u}_i (resp. les \mathbf{v}_i^\top) sont orthonormés et engendrent le même espace que celui engendré par les colonnes (resp. les lignes) de X

$$\text{vect}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p) = \text{vect}(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r)$$

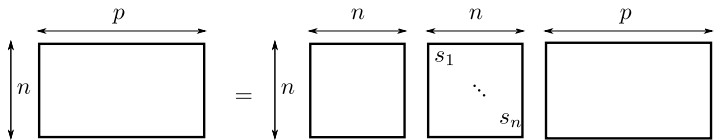
SVD réduite

The diagram illustrates the reduced SVD decomposition of a matrix X . On the left, matrix X is shown as a rectangle with height n and width p . This is followed by an equals sign. To the right of the equals sign are three matrices: U , Σ , and V^T . Matrix U is a square with height n and width n . Matrix Σ is a rectangle with height n and width p ; its diagonal elements are labeled s_1, \dots, s_n and it contains a large 0 in the bottom right corner. Matrix V^T is a square with height p and width p . Below the matrices, the equation is written as $X = U \cdot \Sigma \cdot V^T$. The word "SVD" is centered below the equation.

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

SVD

SVD réduite



The diagram illustrates the reduced SVD decomposition of a matrix X . On the left, matrix X is represented by a rectangle with height n and width p . This is followed by an equals sign. To the right of the equals sign are three matrices: U , Σ , and V^T . Matrix U is a square with height n and width n . Matrix Σ is a square with height n and width n , containing the singular values s_1, \dots, s_n along its diagonal. Matrix V^T is a rectangle with height n and width p . The matrices are separated by dots, indicating their product.

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

SVD réduite

SVD réduite

The diagram illustrates the SVD decomposition of a matrix X of size $n \times p$. It is equal to the product of three matrices: U (size $n \times n$), Σ (size $n \times p$), and V^T (size $p \times p$). The Σ matrix is shown with its diagonal elements s_1, \dots, s_p and a large 0 in the bottom right, indicating that only the first p columns are non-zero. The dimensions are indicated by arrows above and to the left of each matrix.

$$\begin{array}{c} \begin{array}{|c|} \hline \text{\scriptsize } n \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \text{\scriptsize } p \\ \hline \end{array} \\ \hline X \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \begin{array}{|c|} \hline \text{\scriptsize } n \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \text{\scriptsize } n \\ \hline \end{array} \cdot \begin{array}{|c|} \hline \text{\scriptsize } p \\ \hline \end{array} \\ \hline U \cdot \Sigma \cdot V^T \\ \hline \end{array}$$

SVD

SVD réduite

The diagram illustrates the reduced SVD decomposition of a matrix X . On the left, matrix X is represented by a rectangle with height n and width p . This is followed by an equals sign. To the right of the equals sign, the decomposition is shown as the product of three matrices: U , Σ , and V^T . Matrix U is a rectangle with height n and width p . Matrix Σ is a square with width p , containing the singular values s_1, \dots, s_p . Matrix V^T is a square with width p .

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

SVD réduite

SVD et meilleure approximation

Théorème (meilleure approximation de rang k)

Soit $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ la SVD compacte de $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$.

On note $X_k = \sum_{i=1}^k s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$, pour tout $k \in \llbracket 1, r \rrbracket$. Ainsi,

$$\min_{Z \in \mathbb{R}^{n \times p} : \text{rang}(Z)=k} \|X - Z\|_2 = \|X - X_k\|_2 = s_{k+1}$$

Rem: la norme spectrale de X est définie par

$$\|X\|_2 = \sup_{u \in \mathbb{R}^p, \|u\|=1} \|Xu\| = s_1(X)$$

Rem: crucial pour l'analyse en composante principale (ACP)

Pseudo-inverse

Définition

Si $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ admet pour SVD $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ avec $r = \text{rang}(X)$, alors sa **pseudo-inverse** $X^+ \in \mathbb{R}^{p \times n}$ est définie par :

$$X^+ = \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top$$

Rem: si $X = \sum_{i=1}^n s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est inversible alors $X^+ = X^{-1}$

Démonstration : $XX^+ = \sum_{j=1}^n s_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top$

Pseudo-inverse

Définition

Si $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ admet pour SVD $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ avec $r = \text{rang}(X)$, alors sa **pseudo-inverse** $X^+ \in \mathbb{R}^{p \times n}$ est définie par :

$$X^+ = \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top$$

Rem: si $X = \sum_{i=1}^n s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est inversible alors $X^+ = X^{-1}$

Démonstration :

$$\begin{aligned} X X^+ &= \sum_{j=1}^n s_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n s_j \frac{1}{s_i} \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \end{aligned}$$

Pseudo-inverse

Définition

Si $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ admet pour SVD $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ avec $r = \text{rang}(X)$, alors sa **pseudo-inverse** $X^+ \in \mathbb{R}^{p \times n}$ est définie par :

$$X^+ = \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top$$

Rem: si $X = \sum_{i=1}^n s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est inversible alors $X^+ = X^{-1}$

Démonstration :

$$\begin{aligned} X X^+ &= \sum_{j=1}^n s_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n s_j \frac{1}{s_i} \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n s_j \frac{1}{s_i} \delta_{i,j} \mathbf{u}_j \mathbf{u}_i^\top = \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top = \text{Id}_n \end{aligned}$$

Pseudo-inverse

Définition

Si $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ admet pour SVD $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ avec $r = \text{rang}(X)$, alors sa **pseudo-inverse** $X^+ \in \mathbb{R}^{p \times n}$ est définie par :

$$X^+ = \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top$$

Rem: si $X = \sum_{i=1}^n s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est inversible alors $X^+ = X^{-1}$

Démonstration :

$$\begin{aligned} X X^+ &= \sum_{j=1}^n s_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \sum_{i=1}^n \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n s_j \frac{1}{s_i} \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \\ &= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n s_j \frac{1}{s_i} \delta_{i,j} \mathbf{u}_j \mathbf{u}_i^\top = \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top = \text{Id}_n \end{aligned}$$

SVD et numérique

Les fonctions SVD et pseudo-inverse sont disponibles dans les bibliothèques numériques classiques, par exemple Numpy

► SVD : `U, s, V = np.linalg.svd(X)`

Attention dans ce cas : `X = U.dot(np.diag(s).dot(V))`
On accède aux variantes compactes ou non par l'option *cf.*
`full_matrices=True/False`

► Pseudo-inverse : `Xinv = np.linalg.pinv(X)`

Exercise: Évaluer numériquement le théorème de meilleure approximation de rang fixé. Pour cela calculer l'erreur d'approximation obtenue pour une matrice tirée aléatoirement selon une loi gaussienne (e.g., de taille 9×6 , pour $k = 3$)

Plan

Algèbre linéaire

L'approche SVD pour les moindres carrés

- SVD et moindres carrés

- Analyse du biais par la SVD

- Analyse de la variance par la SVD

- Stabilité numérique

Retour sur les moindres carrés

Partons de la SVD de X , $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) - \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

Retour sur les moindres carrés

Partons de la SVD de X , $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) - \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) \right\|^2 + \left\| \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

Retour sur les moindres carrés

Partons de la SVD de X , $X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) - \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) \right\|^2 + \left\| \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \sum_{i=1}^r (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2 + \sum_{i=r+1}^n (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2$$

Retour sur les moindres carrés

Partons de la SVD de X ,
$$X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) - \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) \right\|^2 + \left\| \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \sum_{i=1}^r (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2 + \sum_{i=r+1}^n (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2$$

Rem: choisir $\beta = \sum_{i=1}^r \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{u}_i}{s_i} \mathbf{v}_i$ annule le 1^{er} terme du 2^d membre

Retour sur les moindres carrés

Partons de la SVD de X ,
$$X = \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r s_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) - \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}) \right\|^2 + \left\| \sum_{i=r+1}^n \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y} \right\|^2$$

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \sum_{i=1}^r (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2 + \sum_{i=r+1}^n (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2$$

Rem: choisir $\beta = \sum_{i=1}^r \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{u}_i}{s_i} \mathbf{v}_i$ annule le 1^{er} terme du 2^d membre

Retour sur les moindres carrés (suite)

$$\|X\beta - \mathbf{y}\|^2 = \sum_{i=1}^r (s_i \mathbf{v}_i^\top \beta - \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2 + \sum_{i=r+1}^n (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2 \geq \sum_{i=r+1}^n (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{y})^2$$

avec égalité si $\beta = \sum_{i=1}^r \frac{\mathbf{y}^\top \mathbf{u}_i}{s_i} \mathbf{v}_i$, or $X^+ = \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top$!

Ainsi **UNE** solution des moindres carrés peut s'écrire :

$$\boxed{\hat{\beta} = X^+ \mathbf{y}} \in \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \frac{1}{2} \|X\beta - \mathbf{y}\|^2$$

Rem: l'ensemble de toutes les solutions est :

$$\left\{ X^+ \mathbf{y} + \sum_{i=r+1}^p \alpha_i \mathbf{v}_i, (\alpha_{r+1}, \dots, \alpha_p) \in \mathbb{R}^{p-r} \right\}$$

Rem: $X^+ \mathbf{y}$ est la solution de norme $\|\cdot\|_2$ minimale

Le biais dans le cas général

Sous l'hypothèse de bruit "blanc" (i.e., $\mathbb{E}(\varepsilon) = 0$) :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\hat{\beta}) &= \mathbb{E}(X^+ \mathbf{y}) = \mathbb{E}(X^+ X \beta^* + X^+ \varepsilon) = X^+ X \beta^* \\ &= \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \sum_{j=1}^r s_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \beta^* \\ &= \sum_{j=1}^r \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^\top \beta^* = \Pi_l \beta^*\end{aligned}$$

- Π_l : projecteur sur l'espace des lignes de X

$$\Pi_l = \sum_{i=1}^r \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^\top = X^+ X$$

- Π_c : projecteur sur l'espace des colonnes de X

$$\Pi_c = \sum_{i=1}^r \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top = X X^+$$

Rem: si $r = \text{rang}(X) = n$ on retrouve que les MCO sont sans biais

Variance dans le cas général

Matrice de variance/covariance des moindres carrés

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) et que X est de plein rang ($\text{rg}(X) = n$) :

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 X^+ (X^+)^{\top}$$

Démonstration : notons $V = \text{Cov}(\hat{\beta})$ et $y = X\hat{\beta} + \varepsilon$

$$\begin{aligned} V &= \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})^{\top} \right] = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - X^+ X \beta^*)(\hat{\beta} - X^+ X \beta^*)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)(X^+ \varepsilon)^{\top} \right] \end{aligned}$$

Variance dans le cas général

Matrice de variance/covariance des moindres carrés

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) et que X est de plein rang ($\text{rg}(X) = n$) :

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 X^+(X^+)^{\top}$$

Démonstration : notons $V = \text{Cov}(\hat{\beta})$ et $y = X\hat{\beta} + \varepsilon$

$$\begin{aligned} V &= \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})^{\top} \right] = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+\varepsilon)(X^+\varepsilon)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[X^+\varepsilon\varepsilon^{\top}(X^+)^{\top} \right] \end{aligned}$$

Variance dans le cas général

Matrice de variance/covariance des moindres carrés

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) et que X est de plein rang ($\text{rg}(X) = n$) :

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 X^+(X^+)^{\top}$$

Démonstration : notons $V = \text{Cov}(\hat{\beta})$ et $y = X\hat{\beta} + \varepsilon$

$$\begin{aligned} V &= \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})^{\top} \right] = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+\varepsilon)(X^+\varepsilon)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[X^+\varepsilon\varepsilon^{\top}(X^+)^{\top} \right] \\ &= \sigma^2 X^+(X^+)^{\top} = \sum_{i=1}^r \frac{\sigma^2}{s_i^2} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^{\top} \end{aligned}$$

Variance dans le cas général

Matrice de variance/covariance des moindres carrés

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) et que X est de plein rang ($\text{rg}(X) = n$) :

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 X^+(X^+)^{\top}$$

Démonstration : notons $V = \text{Cov}(\hat{\beta})$ et $y = X\hat{\beta} + \varepsilon$

$$\begin{aligned} V &= \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})^{\top} \right] = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+\varepsilon)(X^+\varepsilon)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[X^+\varepsilon\varepsilon^{\top}(X^+)^{\top} \right] \\ &= \sigma^2 X^+(X^+)^{\top} = \sum_{i=1}^r \frac{\sigma^2}{s_i^2} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^{\top} \end{aligned}$$

Rem: si $\text{rg}(X) = n$ on retrouve $\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X^{\top}X)^{-1}$

Variance dans le cas général

Matrice de variance/covariance des moindres carrés

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) et que X est de plein rang ($\text{rg}(X) = n$) :

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 X^+(X^+)^{\top}$$

Démonstration : notons $V = \text{Cov}(\hat{\beta})$ et $y = X\hat{\beta} + \varepsilon$

$$\begin{aligned} V &= \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})(\hat{\beta} - \mathbb{E}\hat{\beta})^{\top} \right] = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)(\hat{\beta} - X^+X\beta^*)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+\varepsilon)(X^+\varepsilon)^{\top} \right] \\ &= \mathbb{E} \left[X^+\varepsilon\varepsilon^{\top}(X^+)^{\top} \right] \\ &= \sigma^2 X^+(X^+)^{\top} = \sum_{i=1}^r \frac{\sigma^2}{s_i^2} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^{\top} \end{aligned}$$

Rem: si $\text{rg}(X) = n$ on retrouve $\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X^{\top}X)^{-1}$

Risque de prédiction

Risque (quadratique) de prédiction $\mathbb{E}\|X\beta^* - X\hat{\beta}\|^2$

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) :

$$R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \beta^*)^\top (X^\top X) (\hat{\beta} - \beta^*) \right] = \sigma^2 \text{rang}(X)$$

Preuve (début identique) :

$$\begin{aligned} R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] \\ &\quad + \beta^{*\top} (\Pi_l - \text{Id}_p)^\top (X^\top X) (\Pi_l - \text{Id}_p) \beta^* \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] = \text{tr}[\mathbb{E}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] \end{aligned}$$

Risque de prédiction

Risque (quadratique) de prédiction $\mathbb{E}\|X\beta^* - X\hat{\beta}\|^2$

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) :

$$R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \beta^*)^\top (X^\top X) (\hat{\beta} - \beta^*) \right] = \sigma^2 \text{rang}(X)$$

Preuve (début identique) :

$$\begin{aligned} R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] \\ &\quad + \beta^{*\top} (\Pi_l - \text{Id}_p)^\top (X^\top X) (\Pi_l - \text{Id}_p) \beta^* \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] = \text{tr}[\mathbb{E}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] \\ &= \mathbb{E}[\text{tr}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] = \mathbb{E}[\text{tr}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] \end{aligned}$$

Risque de prédiction

Risque (quadratique) de prédiction $\mathbb{E}\|X\beta^* - X\hat{\beta}\|^2$

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) :

$$R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \beta^*)^\top (X^\top X) (\hat{\beta} - \beta^*) \right] = \sigma^2 \text{rang}(X)$$

Preuve (début identique) :

$$\begin{aligned} R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] \\ &\quad + \beta^{*\top} (\Pi_l - \text{Id}_p)^\top (X^\top X) (\Pi_l - \text{Id}_p) \beta^* \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] = \text{tr}[\mathbb{E}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] \\ &= \mathbb{E}[\text{tr}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] = \mathbb{E}[\text{tr}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] \\ &= \text{tr}[\mathbb{E}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] = \text{tr} \Pi_c \mathbb{E}(\varepsilon \varepsilon^\top) \Pi_c^\top \end{aligned}$$

Risque de prédiction

Risque (quadratique) de prédiction $\mathbb{E}\|X\beta^* - X\hat{\beta}\|^2$

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) :

$$R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \beta^*)^\top (X^\top X) (\hat{\beta} - \beta^*) \right] = \sigma^2 \text{rang}(X)$$

Preuve (début identique) :

$$\begin{aligned} R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] \\ &\quad + \beta^{*\top} (\Pi_l - \text{Id}_p)^\top (X^\top X) (\Pi_l - \text{Id}_p) \beta^* \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] = \text{tr}[\mathbb{E}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] \\ &= \mathbb{E}[\text{tr}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] = \mathbb{E}[\text{tr}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] \\ &= \text{tr}[\mathbb{E}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] = \text{tr} \Pi_c \mathbb{E}(\varepsilon \varepsilon^\top) \Pi_c^\top \\ &= \sigma^2 \text{tr}(\Pi_c) = \sigma^2 \text{rang}(\Pi_c) = \sigma^2 r = \sigma^2 \text{rang}(X) \end{aligned}$$

Risque de prédiction

Risque (quadratique) de prédiction $\mathbb{E}\|X\beta^* - X\hat{\beta}\|^2$

Sous l'hypothèse de modèle homoscédastique ($\mathbb{E}(\varepsilon\varepsilon^\top) = \sigma^2 \text{Id}_n$) :

$$R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) = \mathbb{E} \left[(\hat{\beta} - \beta^*)^\top (X^\top X) (\hat{\beta} - \beta^*) \right] = \sigma^2 \text{rang}(X)$$

Preuve (début identique) :

$$\begin{aligned} R_{\text{pred}}(\beta^*, \hat{\beta}) &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] \\ &\quad + \beta^{*\top} (\Pi_l - \text{Id}_p)^\top (X^\top X) (\Pi_l - \text{Id}_p) \beta^* \\ &= \mathbb{E} \left[(X^+ \varepsilon)^\top (X^\top X) (X^+ \varepsilon) \right] = \text{tr}[\mathbb{E}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] \\ &= \mathbb{E}[\text{tr}(\varepsilon^\top \Pi_c^\top \Pi_c \varepsilon)] = \mathbb{E}[\text{tr}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] \\ &= \text{tr}[\mathbb{E}(\Pi_c \varepsilon \varepsilon^\top \Pi_c^\top)] = \text{tr} \Pi_c \mathbb{E}(\varepsilon \varepsilon^\top) \Pi_c^\top \\ &= \sigma^2 \text{tr}(\Pi_c) = \sigma^2 \text{rang}(\Pi_c) = \sigma^2 r = \sigma^2 \text{rang}(X) \end{aligned}$$

Quelques mots de stabilité numérique

Prenons $\hat{\beta} = X^+ \mathbf{y}$ comme solution des moindres carrés.

Supposons qu'on observe maintenant non plus \mathbf{y} mais $\mathbf{y} + \Delta$ où Δ est une erreur très petite : $\|\Delta\| \ll \|\mathbf{y}\|$.

Alors l'estimateur des moindres carrés pour $\mathbf{y} + \Delta$ par X donne

$$\hat{\beta}^\Delta = X^+(\mathbf{y} + \Delta)$$

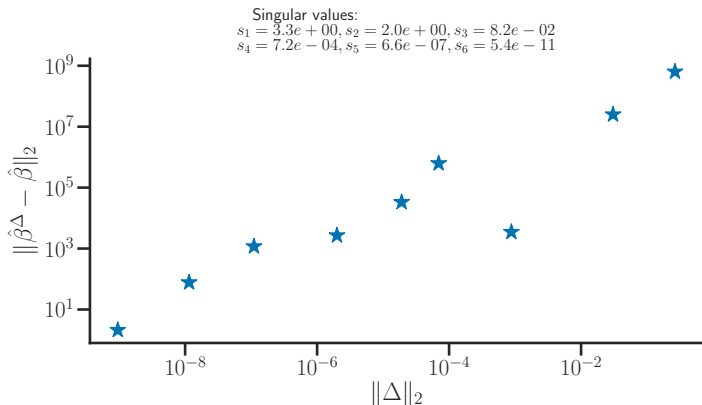
$$\hat{\beta}^\Delta = \hat{\beta} + X^+ \Delta$$

$$\hat{\beta}^\Delta = \hat{\beta} + \sum_{i=1}^r \frac{1}{s_i} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^\top \Delta$$

Rem: Noter l'influence des “petites” valeurs singulières.

Exemple de problème de conditionnement

$X \in \mathbb{R}^{10 \times 6}$ dont les valeurs singulières sont ci-dessous ⁽¹⁾ :



Amplification des erreurs

(1). voir code SVD.ipynb associé

Prochains cours

Remèdes possibles contre les mauvais “conditionnements”

- ▶ Régulariser le spectre / les valeurs singulières
- ▶ Contraindre les coefficients de $\hat{\beta}$ à n'être pas trop grands

Une solution rendant ces deux points de vue équivalents : *Ridge Regression* / Régularisation de Tychonoff

Références

- ▶ GOLUB, G. H. et C. F. VAN LOAN. *Matrix computations*. Third. Baltimore, MD : Johns Hopkins University Press, 1996, p. xxx+698.