

МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ (PRINCIPAL COMPONENT ANALYSIS, PCA)

МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

Цель: *хотим придумать новые признаки, каким-то образом выражающиеся через старые, причем новых признаков хочется получить меньше, чем старых.*

Сегодня будем рассматривать только случай, когда новые признаки **линейно** выражаются через старые.

МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

Постановка задачи:

- x_1, \dots, x_n - исходные числовые признаки
- z_1, \dots, z_d - новые числовые признаки, $d \leq n$

Хотим:

1. чтобы новые числовые признаки z_j линейно выражались через исходные признаки x_i
2. чтобы при переходе к новым признакам было потеряно наименьшее количество исходной информации

МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

1. чтобы новые числовые признаки z_j линейно выражались через исходные признаки x_i

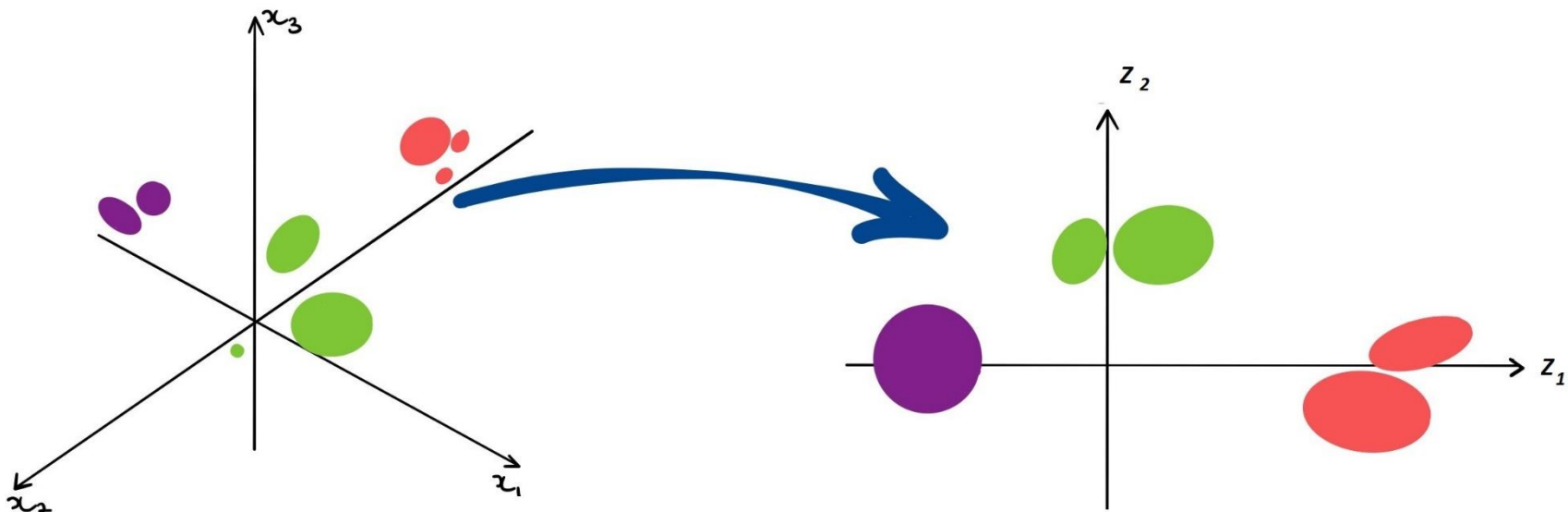
$$\begin{cases} z_1 = u_{11}x_1 + \dots + u_{1n}x_n \\ z_2 = u_{21}x_1 + \dots + u_{2n}x_n \\ \dots \\ z_d = u_{d1}x_1 + \dots + u_{dn}x_n \end{cases}$$

Геометрическая интерпретация: новые признаки z_i — это проекции исходных признаков x_i на некоторые векторы (компоненты) u .

МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

1. чтобы новые числовые признаки z_j линейно выражались через исходные признаки x_i

Геометрически это означает, что мы проецируем пространство признаков размерности n на некоторое линейное подпространство размерности d :



ПОЯСНЕНИЕ: ПРОЕКЦИЯ

- Проекция вектора x на вектор (компоненту) u_i :
$$(x, u_i)$$

- Проекция выборки X на компоненту u_i :
$$Xu_i$$

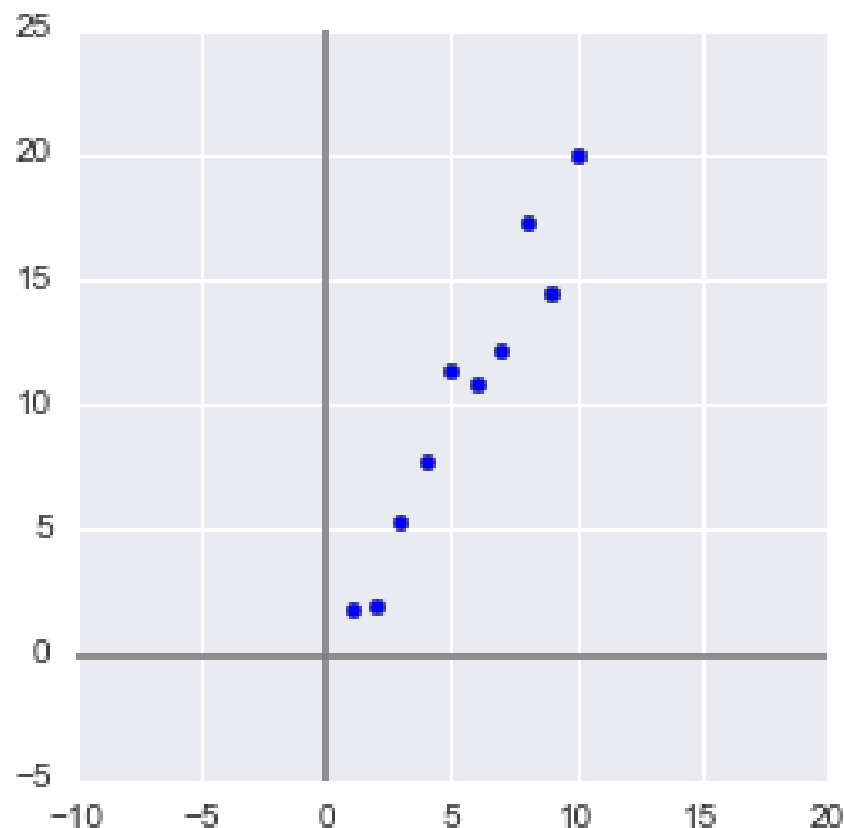
МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

2. чтобы при переходе к новым признакам **было потеряно наименьшее количество исходной информации.**

Дисперсия выборки, посчитанная в новых признаках, показывает, как много информации нам удалось сохранить после понижения размерности, поэтому **дисперсия в новых признаках должна быть максимальной.**

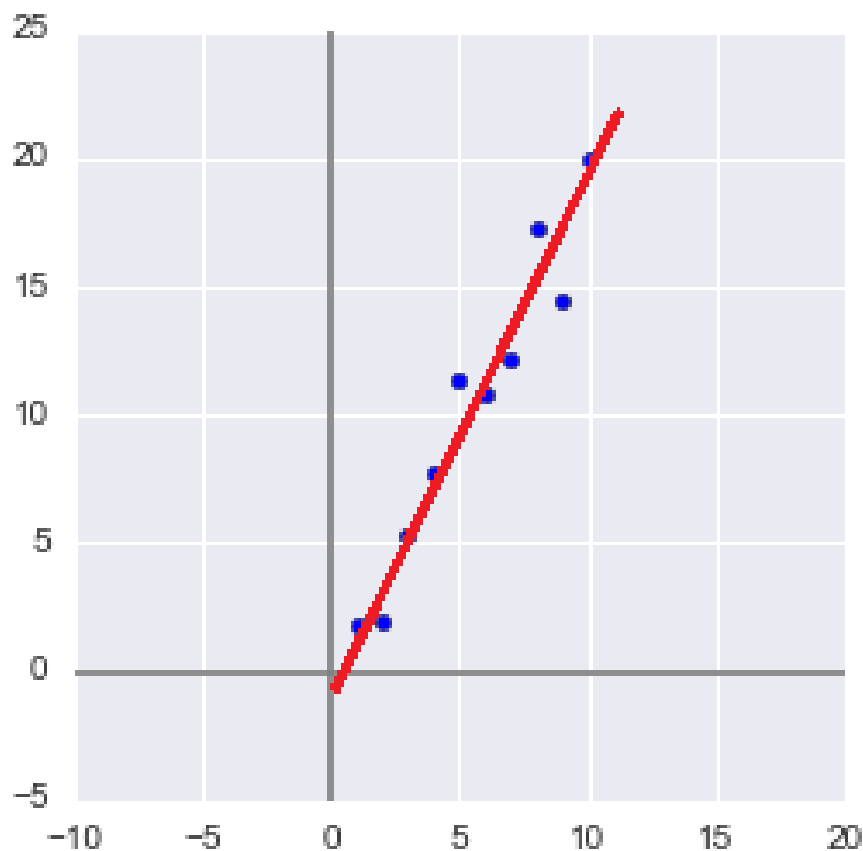
ПРИМЕР

Хотим спроецировать двумерные данные X на одномерный вектор u так, чтобы дисперсия проекции Xu была максимальной:



ПРИМЕР

Хотим спроецировать двумерные данные X на одномерный вектор u так, чтобы дисперсия проекции Xu была максимальной:



ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем искать такие компоненты u_1, u_2, \dots, u_d , что:

- 1) Они ортогональны, т.е. $(u_i, u_j) = 0$
- 2) Они нормированы, т.е. $\|u_i\| = 1$
- 3) дисперсия проекции выборки на них максимальна:

$$D(Xu_i) \rightarrow \max_{u_i}, \quad i = 1, \dots, d$$

ВАЖНОЕ ДЕЙСТВИЕ

Центрируем исходные данные, то есть вычтем из каждого признака его среднее значение.

ДИСПЕРСИЯ ПРОЕКЦИИ

- Мы уже выяснили, что проекция выборки X на компоненту u_i :

$$Xu_i$$

- Тогда проекция выборки на первые d компонент, задаваемых столбцами матрицы U_d :

$$XU_d$$

ДИСПЕРСИЯ ПРОЕКЦИИ

- Мы уже выяснили, что проекция выборки X на компоненту u_i :

$$Xu_i$$

- Тогда проекция выборки на первые d компонент, задаваемых столбцами матрицы U_d :

$$XU_d$$

- Тогда дисперсия проекции – это след ковариационной матрицы:

$$\text{tr}((XU_d)^T(XU_d)) = \sum_{i=1}^d ||Xu_i||^2 \rightarrow \max_u$$

ПЕРВЫЙ ШАГ

- Будем искать первую компоненту, u_1 :

$$\begin{cases} ||Xu_1||^2 \rightarrow \max_{u_1} \\ ||u_1||^2 = 1 \end{cases}$$

ПЕРВЫЙ ШАГ

- Будем искать первую компоненту, u_1 :

$$\begin{cases} ||Xu_1||^2 \rightarrow \max_{u_1} \\ ||u_1||^2 = 1 \end{cases}$$

Решение:

- Запишем лагранжиан

$$L(u_1, \lambda) = ||Xu_1||^2 + \lambda(||u_1||^2 - 1)$$

ПЕРВЫЙ ШАГ

- Будем искать первую компоненту, u_1 :

$$\begin{cases} ||Xu_1||^2 \rightarrow \max_{u_1} \\ ||u_1||^2 = 1 \end{cases}$$

Решение:

- Запишем лагранжиан

$$L(u_1, \lambda) = ||Xu_1||^2 + \lambda(||u_1||^2 - 1)$$

- $\frac{\partial L}{\partial u_1} = ?$

ПЕРВЫЙ ШАГ

- Будем искать первую компоненту, u_1 :

$$\begin{cases} ||Xu_1||^2 \rightarrow \max_{u_1} \\ ||u_1||^2 = 1 \end{cases}$$

Решение:

- Запишем лагранжиан

$$L(u_1, \lambda) = ||Xu_1||^2 + \lambda(||u_1||^2 - 1)$$

- $\frac{\partial L}{\partial u_1} = 2X^T Xu_1 + 2\lambda u_1 = 0 \Rightarrow X^T Xu_1 = -\lambda u_1$ - собств.в-р.

ПЕРВЫЙ ШАГ

- Будем искать первую компоненту, u_1 :

$$\begin{cases} ||Xu_1||^2 \rightarrow \max_{u_1} \\ ||u_1||^2 = 1 \end{cases}$$

Решение:

- Запишем лагранжиан

$$L(u_1, \lambda) = ||Xu_1||^2 + \lambda(||u_1||^2 - 1)$$

- $\frac{\partial L}{\partial u_1} = 2X^T Xu_1 + 2\lambda u_1 = 0 \Rightarrow X^T Xu_1 = -\lambda u_1$ - собств.в-р.
- $||Xu_1||^2 = u_1^T X^T Xu_1 = \lambda u_1^T u_1 = \lambda \rightarrow \max_{u_1}$ - max
собств. значение.

ПЕРВЫЙ ШАГ

- Будем искать первую компоненту, u_1 :

$$\begin{cases} ||Xu_1||^2 \rightarrow \max_{u_1} \\ ||u_1||^2 = 1 \end{cases}$$

Ответ:

u_1 - собственный вектор матрицы ковариаций $X^T X$ с максимальным собственным значением.

ПРОЕКЦИИ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

- Пусть X – матрица объект-признак для исходных признаков.
- Метод главных компонент делает проекцию исходных объектов на гиперплоскость некоторой размерности d .

Теорема. Базисные векторы этой гиперплоскости – это собственные векторы матрицы $X^T X$ (матрица ковариаций), соответствующие d её наибольшим собственным значениям.

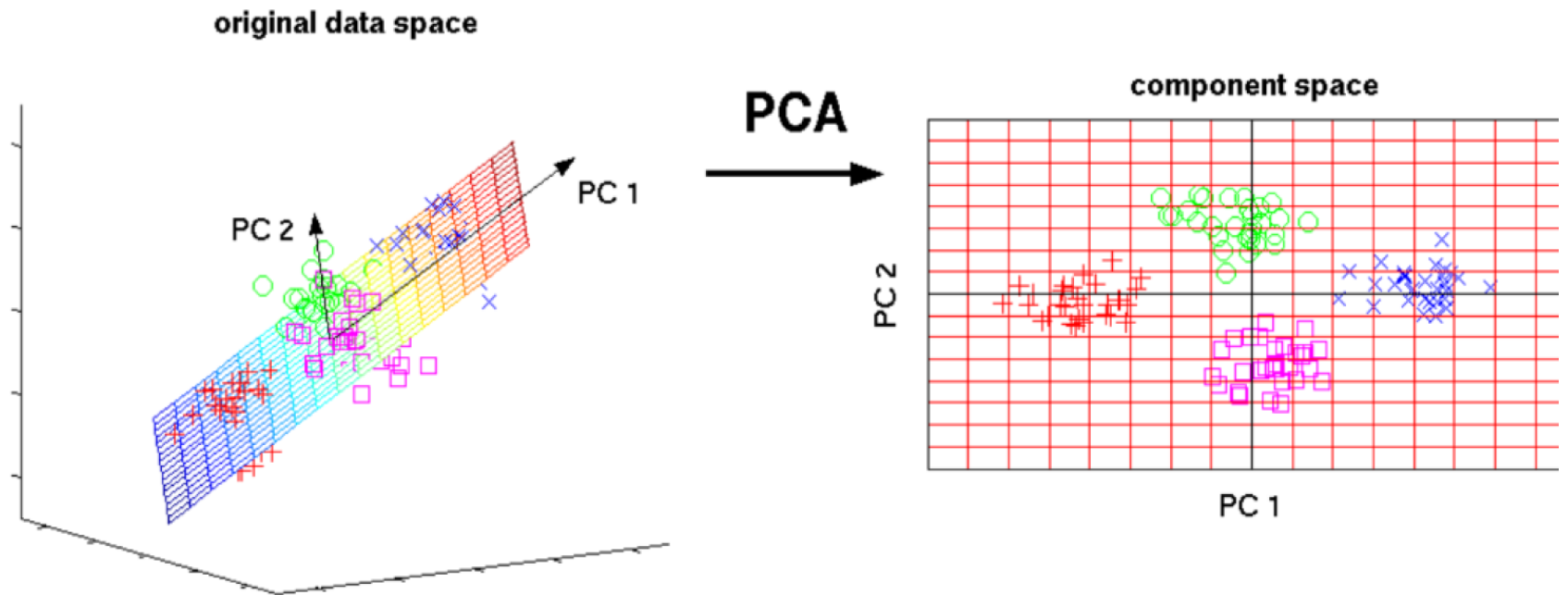
КОНСТРУКТИВНОЕ ПОСТРОЕНИЕ БАЗИСА В РСА

- Находим вектор $u_1 = \operatorname{argmax}_u (D(Xu))$ и нормируем его: $u_1 \rightarrow \frac{u_1}{\|u_1\|}$
- Находим вектор $u_2 = \operatorname{argmax}_u (D(Xu))$ такой, что $(u_1, u_2) = 0$ и нормируем его: $u_2 \rightarrow \frac{u_2}{\|u_2\|}$
- Находим вектор $u_3 = \operatorname{argmax}_u (D(Xu))$ такой, что $(u_1, u_3) = (u_2, u_3) = 0$ и нормируем его: $u_3 \rightarrow \frac{u_3}{\|u_3\|}$.

И т.д.

Получаем ортонормированный базис $\{u_1, u_2, \dots, u_d\}$.

ПРОЕКЦИЯ НА ГИПЕРПЛОСКОСТЬ



ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА

- Когда главные компоненты найдены, можно проецировать на них и новые данные:

$$Z' = X'U_d.$$

ДОЛЯ ОБЪЯСНЕННОЙ ДИСПЕРСИИ

- Упорядочим собственные значения матрицы $X^T X$ по убыванию: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots > \lambda_n \geq 0$.

- Доля дисперсии, объяснённой j -й компонентой (explained variance ratio):

$$\delta_j = \frac{\lambda_j}{\sum_{i=1}^n \lambda_i}$$

- Доля дисперсии, объясняемой первыми k компонентами:

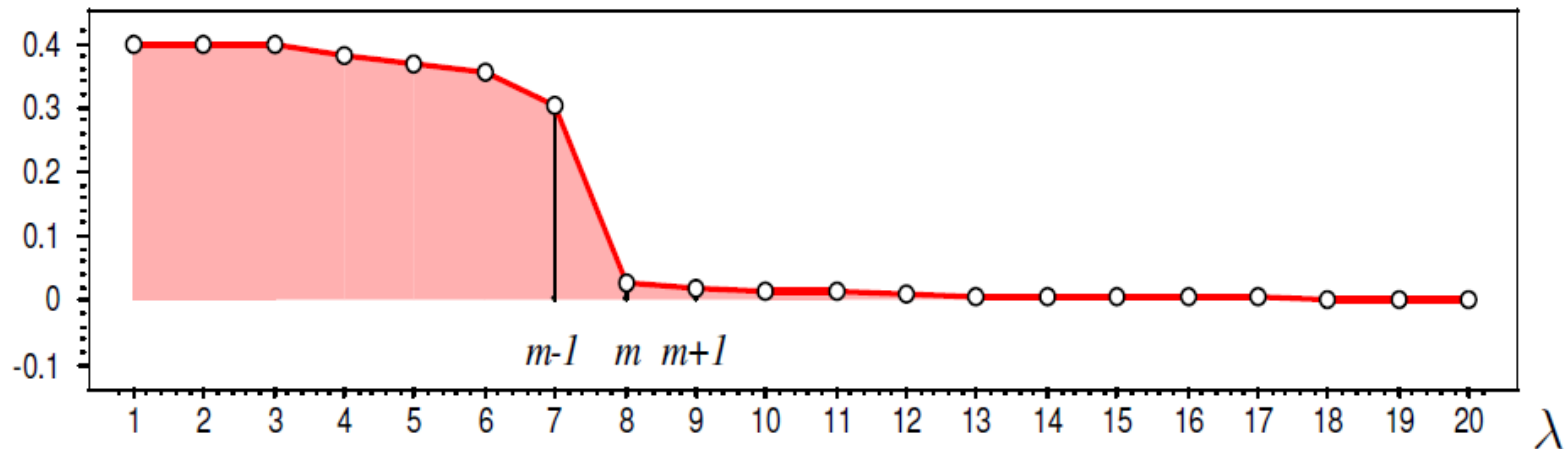
$$\delta = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n} = \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_i}{\sum_{i=1}^n \lambda_i}$$

ВЫБОР ЧИСЛА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

- Эффективная размерность выборки – это наименьшее целое m , при котором *доля необъясненной дисперсии*

$$E_m = \frac{\|ZU^T - X\|^2}{\|X\|^2} = \frac{\lambda_{m+1} + \dots + \lambda_n}{\sum_{i=1}^n \lambda_i} \leq \varepsilon$$

Критерий крутого склона:



ПРИМЕР: FACES DATASET



FACES DATASET (ГЛАВНЫЕ КОМПОНЕНТЫ)



ВОССТАНОВЛЕННОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ

#efaces=1, res=57.804

#efaces=2, res=57.611

#efaces=5, res=54.054

#efaces=10, res=52.01

#efaces=20, res=45.897



#efaces=40, res=35.868

#efaces=60, res=29.624

#efaces=80, res=24.103

#efaces=100, res=20.317

#efaces=150, res=16.154



#efaces=200, res=13.257

#efaces=300, res=9.581

#efaces=400, res=6.908

#efaces=1000, res=0.924

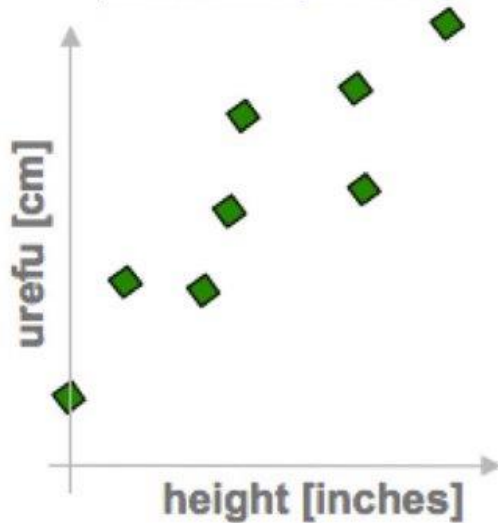
#efaces=1071, res=0.653



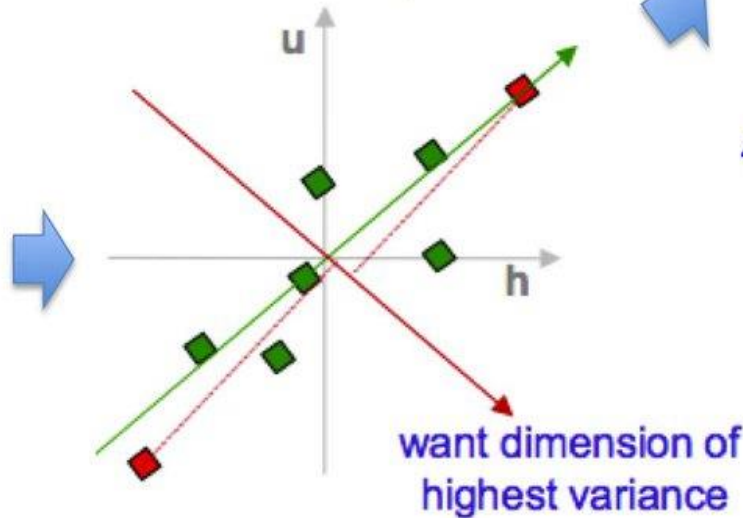
PCA in a nutshell

1. correlated hi-d data

("urefu" means "height" in Swahili)



2. center the points



3. compute covariance matrix

$$\begin{matrix} & h & u \\ h & \begin{pmatrix} 2.0 & 0.8 \end{pmatrix} \\ u & \begin{pmatrix} 0.8 & 0.6 \end{pmatrix} \end{matrix} \rightarrow \text{cov}(h,u) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h_i u_i$$

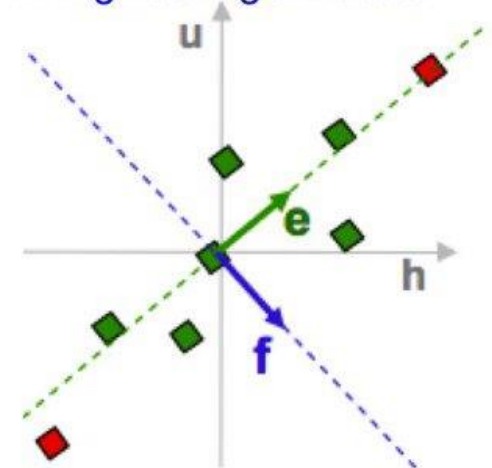
4. eigenvectors + eigenvalues

$$\begin{pmatrix} 2.0 & 0.8 \\ 0.8 & 0.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_h \\ e_u \end{pmatrix} = \lambda_e \begin{pmatrix} e_h \\ e_u \end{pmatrix}$$

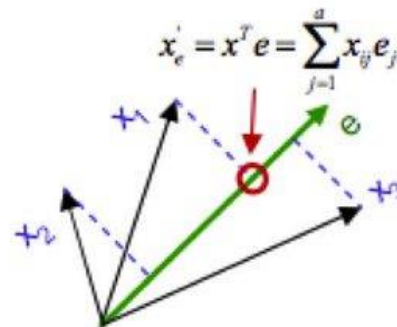
$$\begin{pmatrix} 2.0 & 0.8 \\ 0.8 & 0.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_h \\ f_u \end{pmatrix} = \lambda_f \begin{pmatrix} f_h \\ f_u \end{pmatrix}$$

`eig(cov(data))`

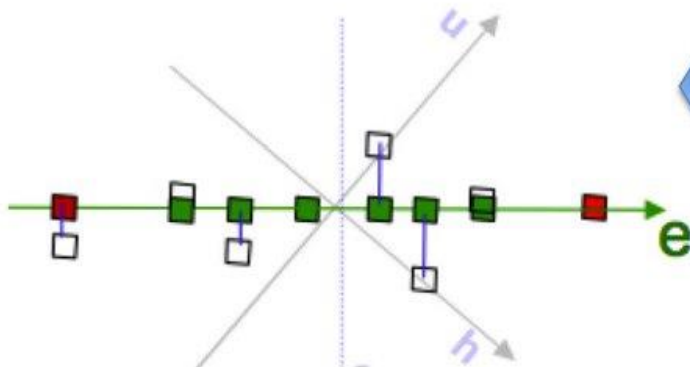
5. pick $m < d$ eigenvectors w. highest eigenvalues



6. project data points to those eigenvectors



7. uncorrelated low-d data



СИНГУЛЯРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ МАТРИЦЫ (SINGULAR VALUE DECOMPOSITION, SVD)

Теорема. Матрицу $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ можно представить в виде

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

- где $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - ортогональные матрицы,
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ - диагональная матрица с ненулевыми элементами $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$, где λ_i - собственные значения матрицы $A^T A$.

СИНГУЛЯРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ МАТРИЦЫ (SVD)

Теорема. Матрицу $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ можно представить в виде

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

- где $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - ортогональные матрицы,
- $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ - диагональная матрица с ненулевыми элементами $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$, где λ_i - собственные значения матрицы $A^T A$.

При этом

- Столбцы матрицы U являются собственными векторами матрицы AA^T
- Столбцы матрицы V являются собственными векторами матрицы $A^T A$.

SINGULAR VALUE DECOMPOSITION

- При $m \leq n$:

$$\begin{array}{c} m \times n \\ \boxed{A} \end{array} = \begin{array}{c} m \times m \\ \boxed{U} \end{array} \cdot \begin{array}{c} m \times n \\ \boxed{\begin{array}{c} \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_m \\ \Sigma \end{array}} \end{array} \cdot \begin{array}{c} n \times n \\ \boxed{V^T} \end{array}$$

$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$

- При $m > n$:

$$\begin{array}{c} m \times n \\ \boxed{A} \end{array} = \begin{array}{c} m \times m \\ \boxed{U} \end{array} \cdot \begin{array}{c} m \times n \\ \boxed{\begin{array}{c} \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n \\ \Sigma \end{array}} \end{array} \cdot \begin{array}{c} n \times n \\ \boxed{V^T} \end{array}$$

СВЯЗЬ SVD И PCA

Пусть X – матрица объект-признак, для которой мы хотим снизить размерность и $X = U\Sigma V^T$ её SVD-разложение.

Тогда:

- Столбцы матрицы V – это собственные векторы матрицы $X^T X$, т.е. векторы v_1, \dots, v_n – главные компоненты.
- Столбцы матрицы $U\Sigma$ – это новые признаки, то есть, проекции исходных признаков на главные компоненты
 $Z = Xv$

$$(X = U\Sigma V^T \Leftrightarrow U\Sigma = XV).$$

- Сингулярные числа матрицы Σ – это корни из собственных чисел матрицы $X^T X$.

СВЯЗЬ SVD И PCA

- Столбцы матрицы V – это собственные векторы матрицы $X^T X$, т.е. векторы v_1, \dots, v_n – главные компоненты.
- Столбцы матрицы $U\Sigma$ – это новые признаки $z = Xv$
($X = U\Sigma V^T \Leftrightarrow U\Sigma = XV$).
- Сингулярные числа матрицы Σ – это корни из собственных чисел матрицы $X^T X$.

Для снижения размерности берем первые k столбцов матрицы U и верхний $k \times k$ -квадрат матрицы Σ , тогда матрица $U_k \Sigma_k$ содержит k новых признаков, соответствующих первым k главным компонентам.

ЧТО ЛУЧШЕ: PCA ИЛИ SVD?

- Существуют вычислительные трудности с нахождением собственных значений, в этом недостаток PCA.
- Существует итерационный алгоритм для нахождения SVD (без нахождения собственных значений)

[http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Простой_итерационный_алгоритм_сингулярного_разложения.](http://www.machinelearning.ru/wiki/index.php?title=Простой_итерационный_алгоритм_сингулярного_разложения)

Поэтому вычислительно эффективнее использовать SVD при прочих равных.