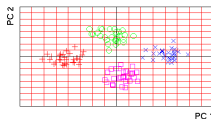
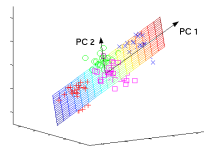


# Метод главных компонент

Виктор Китов

[victorkitov.github.io](https://victorkitov.github.io)



Курс поддержан  
фондом  
'Интеллект'



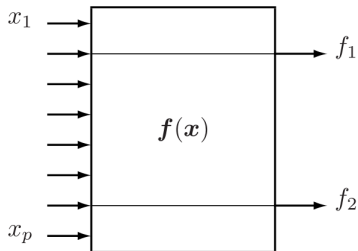
Победитель  
конкурса VK среди  
курсов по IT



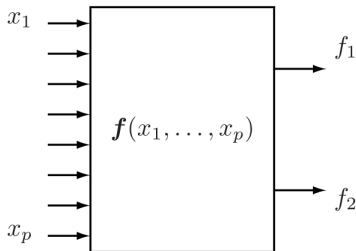
# Содержание

- 1 Задача снижения размерности
- 2 Применение метода главных компонент
- 3 Разброс распределения признаков
- 4 Подпространство наилучшей аппроксимации
- 5 Построение главных компонент
- 6 Оптимальность главных компонент

# Задача снижения размерности



(a) feature selector



(b) feature extractor

**Снижение размерности:** трансформация признаков в уменьшенное число признаков, зависящих от всех входных в общем случае.

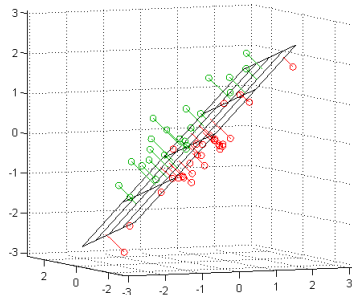
## Применения снижения размерности

Применения снижения размерности:

- Визуализация многомерных данных в 2D или 3D
- Снижение вычислительных ресурсов при обучении и применении
  - процессор, память, хранение на диске, пересылка
- Повышение интерпретируемости модели
  - если извлеченные признаки интерпретируемы
- Повышение устойчивости некоторых методов
  - при линейно-зависимых признаках коэффициенты лин. регрессии не определены

## Категоризация методов снижения размерности

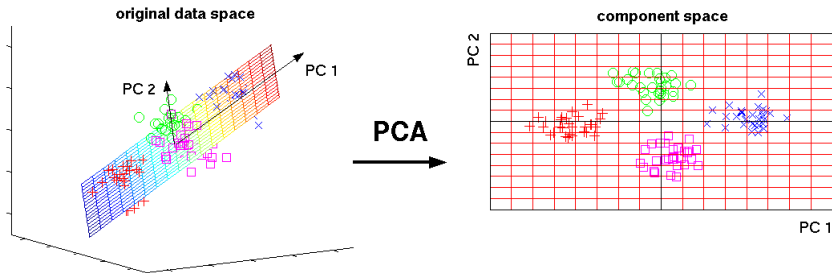
- Снижение размерности - с учителем/без учителя, линейное/нелинейное
- Метод главных компонент - линейный метод снижения размерности без учителя.



# Содержание

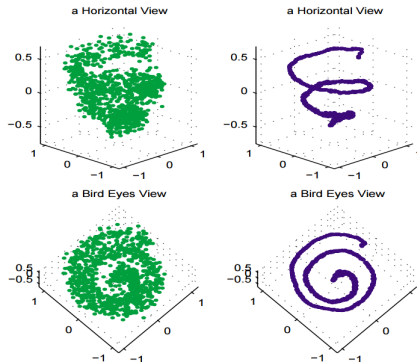
- 1 Задача снижения размерности
- 2 Применение метода главных компонент**
- 3 Разброс распределения признаков
- 4 Подпространство наилучшей аппроксимации
- 5 Построение главных компонент
- 6 Оптимальность главных компонент

# Визуализация



# Фильтрация данных

Убираем шум из данных<sup>1</sup>:



<sup>1</sup>X. Huo and Jihong Chen (2002). Local linear projection (LLP). First IEEE Workshop on Genomic Signal Processing and Statistics (GENSIPS).



## Снижение размерности

Задача идентификации человека по лицу:



Для фото  $H \times W$ :  $HW$  признаков, переобучение.

# Главные компоненты (eigenfaces)

Главные компоненты (eigenfaces).



Проекции на гл. компоненты - информативные признаки.

## Анализ текстов

- Объекты - текстовые файлы.
- Индикаторные, TF, TF-IDF кодировки приводят в высокому  $D$ .
  - вычислительно долгая работа с  $X$  и настройкой моделей
- Разреженность данных приводит к проблемам:
  - например, задача поиска:  
"ремонт машины"  $\neq$  "обслуживание автомобилей"

## Анализ текстов

- Объекты - текстовые файлы.
- Индикаторные, TF, TF-IDF кодировки приводят в высокому  $D$ .
  - вычислительно долгая работа с  $X$  и настройкой моделей
- Разреженность данных приводит к проблемам:
  - например, задача поиска:  
"ремонт машины"  $\neq$  "обслуживание автомобилей"
- Снижение размерности PCA позволяет решить эти проблемы.
  - технически-через сокр. сингулярное разложение
  - достаточно 200-300 гл. компонент
  - признаки не центрируются, чтобы не потерять разреженность
  - англ. latent semantic analysis (LSA)

# Содержание

- 1 Задача снижения размерности
- 2 Применение метода главных компонент
- 3 Разброс распределения признаков**
- 4 Подпространство наилучшей аппроксимации
- 5 Построение главных компонент
- 6 Оптимальность главных компонент

## Матрица ковариации

- Матрица ковариации

$$\Sigma = \{cov(x^i, x^j)\}_{i,j=1}^D = \{\mathbb{E}\{(x^i - \mathbb{E}x^i)(x^j - \mathbb{E}x^j)\}\}$$

- Из определения  $\Sigma = \Sigma^T$ .
- Свойства симметричных матриц:
  - все СЗ симметричной матрицы вещественные.
  - существует ортонормированный базис из СВ.

### Теорема (Спектральное разложение.)

Любая симметричная  $\Sigma \in \mathbb{R}^{D \times D}$  может быть представлена как

$$\Sigma = A \Lambda A^T$$

где  $A \in \mathbb{R}^{D \times D}$  - ортогональная матрица, столбцы которой  $a_1, \dots, a_D$  - СВ, а  $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_D\}$  с СЗ  $\Sigma$  на диагонали.

## Дисперсия распределения вдоль направления

Для случайной величины  $x \in \mathbb{R}^D$ ,  $x \sim F(\mu, \Sigma)$ , и  $\forall b \in \mathbb{R}^D$ :

$$\begin{aligned} \text{var}(b^T x) &= \mathbb{E} \left\{ (b^T x - b^T \mu)^2 \right\} \\ &= \mathbb{E} \left\{ (b^T x - b^T \mu) (x^T b - \mu^T b) \right\} \\ &= b \mathbb{E} \left\{ (x - \mu) (x - \mu)^T \right\} b = b^T \Sigma b \end{aligned}$$

Поскольку  $b$  - произвольно, то  $\Sigma \succeq 0$ , т.к.  $b^T \Sigma b = \text{var}(b^T x) \geq 0$ .

- следовательно все  $\lambda_i \geq 0$ , т.к.  $0 \leq a_i^T \Sigma a_i = \lambda_i a_i^T a_i = \lambda_i$

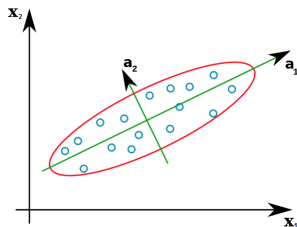
## Дисперсия распределения вдоль разных направлений

- Для различных  $b \in \mathbb{R}^D$ ,  $\|b\| = 1$ :

$b^T x$  — проекция на ось  $b$ .

$$\begin{aligned}\text{var}(b^T x) &= b^T \Sigma b = b^T A \Lambda A^T b = \\ &= \left( \Lambda^{1/2} A^T b \right)^T \left( \Lambda^{1/2} A^T b \right) = \left\| \Lambda^{1/2} A^T b \right\|^2\end{aligned}$$

- Интуиция:  $b \rightarrow$  в базис СВ, координаты масштабируются на  $\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_D}$ .





## Направления максимального разброса

- Упорядочим СВ  $a_1, \dots, a_D$  по убыванию СЗ  
 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_D \geq 0$ .
- $a_1, \dots, a_D$  - называются главными компонентами
  - $a_1$  - направление макс. дисперсии  $\text{var}(a_1^T x) = \lambda_1$
  - $a_2$  - ортогональное  $a_1$  направление макс. дисперсии  
 $\text{var}(a_2^T x) = \lambda_2$
  - $a_3$  - ортогональное  $a_1, a_2$  направление макс. дисперсии  
 $\text{var}(a_3^T x) = \lambda_3$
  - ...
- Относительный разброс вдоль осей  $a_1, \dots, a_D$ :

$$\frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \dots + \lambda_D}, \dots, \frac{\lambda_D}{\lambda_1 + \dots + \lambda_D}$$

## Оценка разброса распределения

Оценим средний разброс сл. вел.  $x \sim F(\mu, \Sigma)$ :

- используя инвариантность  $\text{tr}$  и  $\det$  к смене базиса<sup>2</sup>

$$\frac{1}{D} (\lambda_1 + \dots + \lambda_D) = \frac{1}{D} \text{trace } \Lambda = \frac{1}{D} \text{trace } A\Lambda A^T = \frac{1}{D} \text{trace } \Sigma$$

$$\sqrt[D]{\lambda_1 \cdot \dots \cdot \lambda_D} = \sqrt[D]{\det \Lambda} = \sqrt[D]{\det A\Lambda A^T} = \sqrt[D]{\det \Sigma}$$

---

<sup>2</sup>Поскольку след и определитель выражаются через СЗ, которые не зависят от смены базиса.

## Метод главных компонент

- Отцентрируем признаки  $x_n := x_n - \mu \ \forall n$
- Матрица попарных скалярных произведений признаков:

$$X^T X = N \frac{1}{N} X^T X = N \hat{\Sigma}$$

- Главные компоненты:  $a_1, \dots, a_D$  - СВ  $\hat{\Sigma}$ , отвечающие СЗ  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_D \geq 0$ .
  - совпадают с СВ  $X^T X$ , а СЗ у  $X^T X$  - в  $N$  раз больше при предварительном центрировании признаков.
- В TF-IDF представлениях текстов признаки не центрируются, т.к. потеряем разреженность.
  - в силу разреженности  $X$  в любом случае  $\mathbb{E}x^i \approx 0$ .
- Метод главных компонент:  $x \rightarrow$  проекции на  $a_1, \dots, a_K$ ,  $K < D$ .

# Содержание

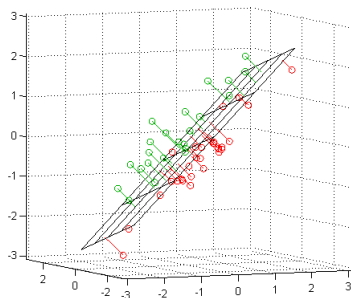
- 1 Задача снижения размерности
- 2 Применение метода главных компонент
- 3 Разброс распределения признаков
- 4 Подпространство наилучшей аппроксимации
  - Определение
  - Оценка качества аппроксимации
  - Проецирование на  $L_K$
- 5 Построение главных компонент
- 6 Оптимальность главных компонент

#### 4 Подпространство наилучшей аппроксимации

- Определение
- Оценка качества аппроксимации
- Проецирование на  $L_K$

## Подпространство наилучшей аппроксимации

Метод главных компонент находит подпространство наилучшей аппроксимации:



Первые  $K$  главных компонент  $a_1, a_2, \dots, a_K$  - ортонормированный базис этого подпространства.

## Проекции, ортогональные дополнения

- Для точки  $x$  и подпространства  $L$  обозначим:
  - $p$ : проекция  $x$  на  $L$
  - $h$ : ортогональное дополнение
  - $x = p + h$ ,  $\langle p, h \rangle = 0$ .
- Для обучающей выборки  $x_1, x_2, \dots, x_N$  и подпространства  $L$  обозначим:
  - проекции:  $p_1, p_2, \dots, p_N$
  - ортогональные дополнения:  $h_1, h_2, \dots, h_N$ .

# Подпространство наилучшей аппроксимации

Рассмотрим  $K$ -мерное подпространство - линейную оболочку базиса  $v_1, v_2, \dots, v_K$ :  $L_K = \mathcal{L}(v_1, v_2, \dots, v_K)$

## Определение 1

$L_K$  - подпространство наилучшей аппроксимации для набора точек  $x_1, x_2, \dots, x_N$ , если решает задачу

$$\sum_{n=1}^N \|h_n\|^2 \rightarrow \min_{L: \text{rg } L=K}$$

## Предложение 1

$L_K$  - подпространство наилучшей аппроксимации для набора точек  $x_1, x_2, \dots, x_N$ , если решает задачу<sup>a</sup>.

$$\sum_{n=1}^N \|p_n\|^2 \rightarrow \max_{L: \text{rg } L=K}$$

<sup>a</sup>Докажите, используя  $\|x\|^2 = \|p\|^2 + \|h\|^2$  для  $x = p + h$  и  $\langle p, h \rangle = 0$ .

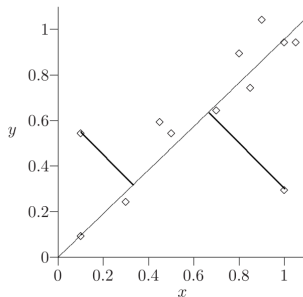


## Свойства главных компонент

- $D$  главных компонент образуют ортонормированный базис пространства признаков.
- Не инвариантны к сдвигу  $x_1, x_2, \dots, x_D$ .
- Не инвариантны к масштабу  $x_1, x_2, \dots, x_D$ .
  - рекомендуется центрировать и приводить к одинаковой шкале.
  - не центрируется для текстовых данных:
    - $X$  - разреженная, поэтому уже  $\bar{x}_i \approx 0$ . Сдвиг сделает  $X$  не разреженной.

## Пример $L_1$

- Рассмотрим одномерное подпространство наилучшей аппроксимации  $L_1$ :



- В чем отличие от нахождения  $y = wx$  в линейной регрессии?

#### 4 Подпространство наилучшей аппроксимации

- Определение
- Оценка качества аппроксимации
- Проецирование на  $L_K$

## Оценка качества аппроксимации

- Величина проекции (со знаком)  $x$  на  $a$ :  $\langle x, a \rangle / \|a\|$
- Т.к.  $a_1, a_2, \dots, a_D$  - ОНБ, для любого  $x$

$$x = \langle x, a_1 \rangle a_1 + \langle x, a_2 \rangle a_2 + \dots + \langle x, a_D \rangle a_D$$

## Оценка качества аппроксимации

- Величина проекции (со знаком)  $x$  на  $a$ :  $\langle x, a \rangle / \|a\|$
- Т.к.  $a_1, a_2, \dots, a_D$  - ОНБ, для любого  $x$

$$x = \langle x, a_1 \rangle a_1 + \langle x, a_2 \rangle a_2 + \dots + \langle x, a_D \rangle a_D$$

- Пусть  $p^K$  - проекция, а  $h^K$  - орт. дополнение  $x$  на  $L_K$ .

$$p^K = \langle x, a_1 \rangle a_1 + \langle x, a_2 \rangle a_2 + \dots + \langle x, a_K \rangle a_K$$

$$h^K = x - p^K = \langle x, a_{K+1} \rangle a_{K+1} + \dots + \langle x, a_D \rangle a_D$$

## Оценка качества аппроксимации

- Величина проекции (со знаком)  $x$  на  $a$ :  $\langle x, a \rangle / \|a\|$
- Т.к.  $a_1, a_2, \dots, a_D$  - ОНБ, для любого  $x$

$$x = \langle x, a_1 \rangle a_1 + \langle x, a_2 \rangle a_2 + \dots + \langle x, a_D \rangle a_D$$

- Пусть  $p^K$  - проекция, а  $h^K$  - орт. дополнение  $x$  на  $L_K$ .

$$p^K = \langle x, a_1 \rangle a_1 + \langle x, a_2 \rangle a_2 + \dots + \langle x, a_K \rangle a_K$$

$$h^K = x - p^K = \langle x, a_{K+1} \rangle a_{K+1} + \dots + \langle x, a_D \rangle a_D$$

- Рассчитаем квадраты длин  $x, p^K, h^K$ :

$$\|x\|^2 = \langle x, x \rangle = \langle x, a_1 \rangle^2 + \dots + \langle x, a_D \rangle^2$$

$$\|p^K\|^2 = \langle p^K, p^K \rangle = \langle x, a_1 \rangle^2 + \dots + \langle x, a_K \rangle^2$$

$$\|h^K\|^2 = \langle h^K, h^K \rangle = \langle x, a_{K+1} \rangle^2 + \dots + \langle x, a_D \rangle^2$$

## Оценка качества аппроксимации

$p_n^K, h_n^K$  - проекция и ортогональное дополнение  $x_n$  для  $L_K$ .

$$L(K) = \frac{\sum_{n=1}^N \|h_n^K\|^2}{\sum_{n=1}^N \|x_n\|^2}, \quad S(K) = \frac{\sum_{n=1}^N \|p_n^K\|^2}{\sum_{n=1}^N \|x_n\|^2}, \quad L(K) + S(K) = 1$$

Вклад  $a_k$  в описание  $x$ :  $\langle x, a_k \rangle^2$ .

Вклад  $a_k$  в описание  $x_1, x_2, \dots, x_N$ :  $\sum_{n=1}^N \langle x_n, a_k \rangle^2$

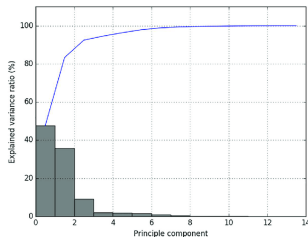
Относительный вклад (explained variance ratio):

$$E(a_k) = \frac{\sum_{n=1}^N \langle x_n, a_k \rangle^2}{\sum_{n=1}^N \sum_{d=1}^D \langle x_n, a_d \rangle^2} = \frac{\sum_{n=1}^N \langle x_n, a_k \rangle^2}{\sum_{n=1}^N \|x_n\|^2}$$

$$E(a_k) \in [0, 1]; \quad \sum_{k=1}^K E(a_k) = S(K)$$

## Выбор числа главных компонент

- Визуализация данных: 2 или 3 компоненты.



- Можно брать  $a_k$ , пока  $E(a_k)$  не упадет резко вниз.
- Или брать по порогу, например

$$K^* = \arg \min_K E(a_K) < 0.01$$

$$K^* = \arg \min_K \{S(K) > 0.95\} = \arg \min_K \left\{ \sum_{k=1}^K E(a_k) > 0.95 \right\}$$



#### 4 Подпространство наилучшей аппроксимации

- Определение
- Оценка качества аппроксимации
- Проецирование на  $L_K$

Расчет  $p^K$  по  $x$ 

$x \rightarrow y$  (значения проекций  $x$  на  $a_1, \dots, a_D$ ):

$$y = A^T(x - \mu)$$

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n, \quad A = [a_1 | a_2 | \dots | a_D] \in \mathbb{R}^{D \times D}$$

Для  $A_K = [a_1 | a_2 | \dots | a_K] \in \mathbb{R}^{D \times K}$ , значения проекций на  $a_1, \dots, a_K$ :

$$y^K = A_K^T(x - \mu)$$

$x \rightarrow p^K$  (вектор проекций в исх. базисе):

$$p^K = A \begin{pmatrix} y^K \\ 0 \end{pmatrix} + \mu = A_K y^K + \mu = A_K A_K^T(x - \mu) + \mu$$

## Численное нахождение главных компонент

- Определяем вектор средних и станд. отклонений каждого признака:

$$\mu, \sigma \in \mathbb{R}^D$$

- Приводим все признаки к нулевому среднему и единой шкале:

$$x_1, \dots, x_N \rightarrow \frac{x_1 - \mu}{\sigma}, \dots, \frac{x_N - \mu}{\sigma}$$

- Формируем матрицу объекты-признаки

$$X = [x_1^T; \dots x_N^T]^T \in \mathbb{R}^{N \times D}$$

- Оцениваем выборочную ковариационную матрицу  $\in \mathbb{R}^{D \times D}$ :

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{N} X^T X$$

## Численное нахождение главных компонент

- По  $\hat{\Sigma}$ : находим СЗ  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_D \geq 0$  и соответствующие СВ  $a_1, a_2, \dots, a_D$ .
  - $\hat{\Sigma} = \hat{\Sigma}^T$ , поэтому существует ОНБ из СВ с вещественными СЗ
  - $\hat{\Sigma} \succeq 0$ , поэтому все СЗ  $\geq 0$
- $a_1, a_2, \dots, a_K$  - первые  $K$  главных компонент,  $k = 1, 2, \dots, D$ .
- Сумма квадратов проекций на  $a_i$ :

$$\|Xa_i\|^2 = \sum_{n=1}^N \langle x_n, a_i \rangle^2 = \lambda_i$$

- Доля объясненной информации  $a_i$ :

$$E(a_i) = \frac{\lambda_i}{\sum_{d=1}^D \lambda_d}$$

# Содержание

- 1 Задача снижения размерности
- 2 Применение метода главных компонент
- 3 Разброс распределения признаков
- 4 Подпространство наилучшей аппроксимации
- 5 Построение главных компонент**
- 6 Оптимальность главных компонент

## Конструктивное определение главных компонент

- $a_1 = \arg \max_a \|Xa\|^2$ , при ограничении  $\langle a, a \rangle = 1$
- $a_2 = \arg \max_a \|Xa\|^2$ , при ограничениях  $\langle a, a \rangle = 1, \langle a, a_1 \rangle = 0$
- $a_3 = \arg \max_a \|Xa\|^2$ , при ограничениях  $\langle a, a \rangle = 1, \langle a, a_1 \rangle = 0, \langle a, a_2 \rangle = 0$
- ... ..
- $a_D = \arg \max_a \|Xa\|^2$ , при ограничениях  $\langle a, a \rangle = 1, \langle a, a_1 \rangle = 0, \dots \langle a, a_{D-1} \rangle = 0$
- $Xa_i = [\langle x_1, a_i \rangle, \dots \langle x_N, a_i \rangle]$  - вектор координат (проекций) всех объектов вдоль  $a_i$ .
- Квадрат нормы через  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ :

$$\|b\|^2 = b^T b, \quad \|Xa\|^2 = (Xa)^T (Xa) = a^T X^T X a$$

## Векторные производные некоторых функций<sup>3</sup>

- Рассмотрим  $x = [x^1, \dots, x^D]$  и  $f(x) = f(x^1, \dots, x^D)$ .

Векторная производная

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} := \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial x^1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x^2} \\ \dots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial x^D} \end{pmatrix}$$

- Для любых  $x, b \in \mathbb{R}^D$ :

$$\frac{\partial [b^T x]}{\partial x} = b, \quad \frac{\partial [x^T x]}{\partial x} = 2x$$

- Для любых  $x \in \mathbb{R}^D$  и симметричной  $B \in \mathbb{R}^{D \times D}$ :

$$\frac{\partial [x^T B x]}{\partial x} = 2Bx$$

---

<sup>3</sup>Докажите их формулу. Как изменится формула для несимметричной  $B$ ?

## Вычисление 1-й главной компоненты

$$\begin{cases} \|Xa_1\|^2 \rightarrow \max_{a_1} \\ \|a_1\| = 1 \end{cases} \quad (1)$$

Лагранжиан оптимизационной задачи (1):

$$L(a_1, \mu) = a_1^T X^T X a_1 - \mu(a_1^T a_1 - 1) \rightarrow \text{extr}_{a_1, \mu}$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_1} = 2X^T X a_1 - 2\mu a_1 = 0$$

поэтому  $a_1$  - один из СВ матрицы  $X^T X$ .



## Вычисление 1-й главной компоненты

Поскольку мы ищем  $\|Xa_1\|^2 \rightarrow \max_{a_1}$  и

$$\|Xa_1\|^2 = (Xa_1)^T Xa_1 = a_1^T X^T Xa_1 = \lambda a_1^T a_1 = \lambda$$

$a_1$  должен быть СВ, отвечающим максимальному СЗ  $\lambda_1$ .

Если существует несколько СВ для  $\lambda_1$ , выберем любой единичной нормы.

## Вычисление 2-й главной компоненты

$$\begin{cases} \|Xa_2\|^2 \rightarrow \max_{a_2} \\ \|a_2\| = 1 \\ a_2^T a_1 = 0 \end{cases} \quad (2)$$

Лагранжиан оптимизационной задачи (2):

$$L(a_2, \mu) = a_2^T X^T X a_2 - \mu(a_2^T a_2 - 1) - \alpha a_1^T a_2 \rightarrow \text{extr}_{a_2, \mu, \alpha}$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_2} = 2X^T X a_2 - 2\mu a_2 - \alpha a_1 = 0 \quad (3)$$

## Вычисление 2-й главной компоненты

Домножая на  $a_1^T$  слева, получим:

$$a_1^T \frac{\partial L}{\partial a_1} = 2a_1^T X^T X a_2 - 2\mu a_1^T a_2 - \alpha a_1^T a_1 = 0 \quad (4)$$

$$\text{т.к. } \langle a_2, a_1 \rangle = 0: \quad 2\mu a_1^T a_2 = 0$$

Поскольку  $a_1^T X^T X a_2 \in \mathbb{R}$  и  $a_1$  - СВ  $X^T X$ :

$$a_1^T X^T X a_2 = (a_1^T X^T X a_2)^T = a_2^T X^T X a_1 = \lambda_1 a_2^T a_1 = 0$$

Следовательно (4) упрощается до  $\alpha a_1^T a_1 = \alpha = 0$  и (3) становится

$$X^T X a_2 - \mu a_2 = 0$$

Значит  $a_2$  - тоже СВ  $X^T X$ .

## Вычисление 2-й главной компоненты

Поскольку мы ищем  $\|Xa_2\|^2 \rightarrow \max_{a_2}$  и

$$\|Xa_2\|^2 = (Xa_2)^T Xa_2 = a_2^T X^T Xa_2 = \lambda a_2^T a_2 = \lambda$$

$a_2$  должен быть СВ, отвечающим 2-му максимальному СЗ  $\lambda_2$ .

Если существует несколько СВ для  $\lambda_1$ , выберем любой, удовлетворяющий (2).

## Вычисление k-й главной компоненты

$$\begin{cases} \|Xa_k\|^2 \rightarrow \max_{a_k} \\ \|a_k\| = 1 \\ a_k^T a_1 = \dots = a_k^T a_{k-1} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Лагранжиан оптимизационной задачи (5):

$$L(a_k, \mu) = a_k^T X^T X a_k - \mu(a_k^T a_k - 1) - \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_j a_k^T a_j \rightarrow \text{extr}_{a_k, \mu, \alpha_1, \dots, \alpha_{k-1}}$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_k} = 2X^T X a_k - 2\mu a_k - \sum_{j=1}^{k-1} \alpha_j a_j = 0 \quad (6)$$

## Вычисление k-й главной компоненты

Домножая на  $a_i^T$  слева для  $i = 1, 2, \dots, k-1$  получим:

$$2a_i^T X^T X a_k - 2\mu a_i^T a_k - \alpha_1 a_i^T a_1 - \dots - \alpha_{k-1} a_i^T a_{k-1} = 0$$

$$\text{т.к. } \forall i \neq j \langle a_i, a_j \rangle = 0 : \quad 2\mu a_i^T a_k = 0, \quad \alpha_j a_i^T a_j = 0 \quad \forall i \neq j \quad (7)$$

Поскольку  $a_i^T X^T X a_2 \in \mathbb{R}$  и  $a_i$  - СВ  $X^T X$ :

$$a_i^T X^T X a_2 = (a_i^T X^T X a_k)^T = a_k^T X^T X a_i = \lambda_i a_k^T a_i = 0$$

Следовательно (7) упрощается до  $\alpha_i a_i^T a_i = \alpha_i = 0$ . Выбирая  $i = 1, 2, \dots, k-1$ , получим  $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_{k-1} = 0$  и (6) становится

$$X^T X a_k - \mu a_k = 0$$

Значит  $a_k$  - тоже СВ  $X^T X$ .

## Вычисление k-й главной компоненты

Поскольку мы ищем  $\|Xa_k\|^2 \rightarrow \max_{a_k}$  и

$$\|Xa_k\|^2 = (Xa_k)^T Xa_k = a_k^T X^T Xa_k = \lambda a_k^T a_k = \lambda$$

$a_k$  должен быть СВ, отвечающим k-му максимальному СЗ  $\lambda_k$ .

Если существует несколько СВ для  $\lambda_k$ , выберем любой, удовлетворяющий (5).

# Содержание

- 1 Задача снижения размерности
- 2 Применение метода главных компонент
- 3 Разброс распределения признаков
- 4 Подпространство наилучшей аппроксимации
- 5 Построение главных компонент
- 6 Оптимальность главных компонент**



$$\mathcal{L}(a_1, a_2, \dots, a_K) = L_K$$

Далее все рассматривается в контексте фиксированной выборки  $X$ ,  $L_K$  - подпространство наилучшей аппроксимации ранга  $K$  для  $X$ .

### Теорема 1

*Линейная оболочка главных компонент  $a_1, a_2, \dots, a_K$ , рассчитанных по  $X$ . Тогда*

$$\mathcal{L}(a_1, a_2, \dots, a_K) = L_K \quad \forall K$$

Доказательство: по индукции. Для  $K = 1$

$$\begin{cases} \|Xa_1\|^2 \rightarrow \max_{a_1} \\ \|a_1\| = 1 \end{cases}$$

$$\|Xa_1\|^2 = \|\langle x_1, a_1 \rangle, \dots, \langle x_N, a_1 \rangle\|^2 = \sum_{n=1}^N p_n^2 \rightarrow \max_{a_1}$$

$$\mathcal{L}(a_1, a_2, \dots, a_K) = L_K$$

Предположим, теорема верна для  $K - 1$ . Рассмотрим оптимальное  $L_K$ ,  $\dim L = K$ , для которого мы всегда можем выбрать ОНБ  $b_1, b_2, \dots, b_K$  такой, что

$$\begin{cases} \|b_K\| = 1 \\ b_K \perp a_1, b_K \perp a_2, \dots, b_K \perp a_{K-1} \end{cases} \quad (8)$$

выбирая  $b_K$  перпендикулярным проекциям  $a_1, a_2, \dots, a_{K-1}$  на  $L_K$ .

$\mathcal{L}(a_1, a_2, \dots, a_K)$  - подпространство наилучшей аппроксимации

Рассмотрим сумму квадратов проекций:

$$\|Xb_1\|^2 + \|Xb_2\|^2 + \dots + \|Xb_{K-1}\|^2 + \|Xb_K\|^2$$

По предположению индукции  $L[a_1, a_2, \dots, a_{K-1}]$  подпространство наилучшей аппроксимации  $K-1$  и  $L[b_1, \dots, b_{K-1}]$  - того же ранга, поэтому сумма квадратов проекций не меньше:

$$\|Xb_1\|^2 + \|Xb_2\|^2 + \dots + \|Xb_{K-1}\|^2 \leq \|Xa_1\|^2 + \|Xa_2\|^2 + \dots + \|Xa_{K-1}\|^2$$

при этом

$$\|Xb_K\|^2 \leq \|Xa_K\|^2$$

т.к.  $b_K$  по (8) удовлетворяет (5) а  $a_K$  оптимальное решение.

## Заключение

- Снижение размерности - преобразование признаков с переходом в пространство меньшей размерности.
- Полезно для повышения точности, интерпретируемости и скорости работы моделей.
- Метод главных компонент - метод линейного снижения размерности без учителя.
- Первые  $K$  главных компонент образуют ОНБ подпространства наилучшей аппроксимации.
  - в среднеквадратичном смысле