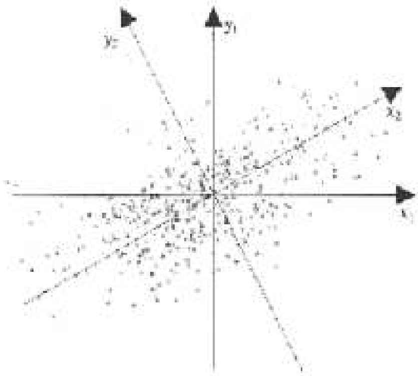
Szinguláris érték szerinti felbontás (emlékeztető)

Hajder Levente

2003. 04. 09.

Főkomponens analízis (PCA)



1. ábra. Főkomponensek problémája

Cél: Megtalálni azt az ortonormált bázisrendszert, amelyekbe az eredeti pontokat áttranszformálva és az utolsó $(m-k)$ bázist elhagyva a hibanégyzetek összege minimális.

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad \text{ahol} \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \phi_1^T \\ \phi_2^T \\ \vdots \\ \phi_n^T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}\mathbf{A}^T = E \quad \text{és} \quad \mathbf{A} \text{ mérete } m \times n$$

Az eredeti, m dimenziót k-ra szeretnénk csökkenteni. Az utolsó $(m-k)$ koordináta elhagyásából származó hiba:

$$\epsilon^2 = \sum_{j=k+1}^{m} \sum_{i=1}^{n} \left(\phi_j^T \mathbf{x}_i\right)^2 = \sum_{j=k+1}^{m} \left(\phi_j^T \mathbf{X}\right) \left(\phi_j^T \mathbf{X}\right)^T = \sum_{j=k+1}^{m} \left(\phi_j^T \mathbf{X}\right) \left(\mathbf{X}^T \phi_j\right) \quad (1)$$

$$\epsilon^2 = \sum_{j=k+1}^{m} \phi_j^T \left(\mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) \phi_j \tag{2}$$

Szélsőérték keresés Lagrange multiplikátoros módszerrel (feltétel:$\phi^T \cdot \phi = 1$) :

$$\tilde{\epsilon}^2 = \sum_{j=k+1}^{m} \left[\phi_j^T \left(\mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) \phi_j - \lambda_j \left(\phi_j^T \phi_j - 1\right)\right] \tag{3}$$

Szélsőérték keresés:

$$\frac{\partial \tilde{\epsilon}^2}{\partial \phi_j} = 2\left(\mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) \phi_j - 2\lambda_j \phi_j = 0 \tag{4}$$

$$\left(\mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) \phi_j = \lambda_j \phi_j \tag{5}$$

Tehát szélsőérték az $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ sajátvektorainak választásával adódik.

Az így keletkezett hiba:

$$\tilde{\epsilon}^2 = \sum_{j=k+1}^{m} \left[\phi_j^T \left(\mathbf{X}\mathbf{X}^T\right) \phi_j\right] = \sum_{j=k+1}^{m} \left[\phi_j^T \lambda_j \phi_j\right] = \sum_{j=k+1}^{m} \lambda_j \tag{6}$$

Tehát $\mathbf{A}$ mátrix sorainak $\mathbf{X}\mathbf{X}^T$ sajátvektorait érdemes választani, és ezek közül a legkisebb sajátértékekhez tartozó sajátvektorokat elhagyni.
A megmaradó sajátvektorok alkotják az új rendszer bázisvektorait.

Példa: arcfelismerés új bázisai (eigenfaces – sajátarcok):

Főkomponens analízis lehetséges alkalmazási területei

- adattömörítés (veszteséges)
- lényegkiemelés (információ dimenziójának csökkentése)
- mátrixok rangjának csökkentése
- stb.

Mátrixok sajátértékei és -vektorai

Probléma/1 (kvadratikus mátrix sajátértéke):

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$$
$$\left(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{E}\right) \mathbf{x} = 0$$
$$\text{Megoldás: } det\left(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{E}\right) = 0$$

A determináns λ-ra nézve n-edfokú polinom, amelynek n darab (komplex, de nem feltétlen különböző) gyöke van.

Probléma/2 (mátrix spektrálfelbontása): Faktorizálni lehet-e egy $\mathbf{A}$ mátrixot $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$ alakban, ahol $\mathbf{\Lambda}$ diagonálmátrix, és $\mathbf{U}\mathbf{V}^T = \mathbf{E}$?

- A két probléma összefügg: ha létezik spektrálfelbontás, $\mathbf{U}$ az $\mathbf{A}$ mátrix jobb oldali sajátvektorait, $\mathbf{V}^T$ a bal oldali sajátvektorait, $\mathbf{\Lambda}$ a sajátértékeket tartalmazza.

Sajátérték/sajátvektor tételek

Tétel: Szimmetrikus mátrix sajátértékei valós számok.

Definíció: Egy $\mathbf{A}$ mátrix normális, ha igaz, hogy $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$.

Definíció: Egy $\mathbf{U}$ mátrix ortonormált, ha igaz, hogy $\mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{E}$.

Tétel: Szimmetrikus mátrixok esetében a spektrálfelbontásból származó $\mathbf{U}$ és $\mathbf{V}$ mátrixok megegyeznek (tehát $\mathbf{U} = \mathbf{V}$), azaz az $\mathbf{A}$ mátrix ortogonális transzformációval diagonalizálható.

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^T \tag{7}$$

Az így kapott $\mathbf{U}$ mátrixot az $\mathbf{A}$ mátrix modálmátrixának nevezik.

Megjegyzés: Ha $\mathbf{A}$ komplex elemeket is tartalmazhat, az állítás normális mátrixokra igaz.

Tétel: A különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorok lineárisan függetlenek egymástól.

Tétel: Ha a szimmentrikus $\mathbf{A}^{n\times n}$ mátrix rangja m, akkor $n-m$ darab sajátérték nulla lesz.

Tétel: A pozitív szemidefinit mátrixok (melyekre igaz, hogy $\forall \mathbf{x} : \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$) valamennyi sajátértéke nemnegatív.

Megjegyzés: Az $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ mátrix pozitív szemidefinit.

Tétel: A spektrálfelbontásban a sajátértékek (a hozzájuk tartozó sajátvektorokkal együtt) sorrendje felcserélhető.

Szinguláris érték szerinti felbontás (SVD)

Definíció: Az $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ mátrix sajátértékeinek négyzetgyökét (sorba rendezve: $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0$) szinguláris értékeknek nevezzük, ahol $\mathbf{A}^{m\times n}$ r-edrangú általános mátrix.

Tétel: (mátrix szinguláris érték szerinti felbontása) legyen $\mathbf{A}$ tetszőleges $m \times n$ típusú valós elemű mátrix, és tegyük fel, hogy $m \geq n$. Ekkor létezik olyan n-edrenű $\mathbf{U}$ és m-edrendű $\mathbf{V}$, ortonormált mátrix, hogy:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad \text{ahol} \quad \mathbf{\Sigma}^{m\times n} = \left[\begin{array}{ccc} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \\ \hline & 0 & \end{array}\right] \begin{array}{l} \\ \\ \\ \}m-n \end{array}$$

A σ_i számok az $\mathbf{A}$ szinguláris értékei, $\mathbf{V}$ az $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ modálmátrixa, $\mathbf{U}$ pedig az $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ modálmátrixa.

SVD felhasználási lehetőségei

- Ahol a főkomponens analízis használható (Az SVD az $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ sajátértékeit a $\mathbf{V}$ modálmátrixban megadja, az új bázisban a koordinátákat pedig az $\mathbf{U}\mathbf{\Sigma}$-ból ki lehet olvasni)
  - lényegkiemelés
  - rangcsökkentés (és -számítás)
  - tömörítés

- Determináns meghatározására: $|\mathbf{A}| = \pm|\mathbf{\Sigma}|$
- Pszeudoinverz meghatározására: $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\dagger\mathbf{U}^T$

Hivatkozások

[1] Rózsa Pál: Lineáris Algebra és alkalmazásai, Tankönyvkiadó, 1991.

[2] Horváth Gábor (szerk.): Neurális hálózatok és műszaki alkalmazásai, Műegyetemi Kiadó, 1998.