Decomposizione Spettrale e Decomposizione in Valori Singolari

Analisi Esplorativa

Aldo Solari

1. Decomposizione Spettrale

2. Matrice dei dati ortogonalizzati

3. Decomposizione in Valori Singolari

Outline

1. Decomposizione Spettrale
2. Matrice dei dati ortogonalizzati
3. Decomposizione in Valori Singolari

Direzione e lunghezza di un vettore

Sia $\underset{k\times1}{a}$ un vettori a valori reali. Allora $\underset{k\times1}{a}$ si può decomporre in due componenti,

- Lunghezza

$$\lambda = \| \underset{k\times1}{a} \| = \sqrt{\underset{1\times k}{a'}\underset{k\times1}{a}} = \sqrt{\sum_{j=1}^{k} a_j^2}$$

- Direzione *normalizzata*

$$\underset{k\times1}{v} = \frac{\underset{k\times1}{a}}{\lambda}$$

con $\| \underset{k\times1}{v} \| = 1$

Autovalori e autovettori

- Questa idea si può estendere ad una matrice simmetrica $\underset{k\times k}{A}$ a valori reali, che è un insieme di vettori
- Gli autovalori (*eigenvalues*) λ e gli autovettori (*eigenvectors*) normalizzati $\underset{k\times 1}{v}$ con $\|\underset{k\times 1}{v}\| = 1$ sono definiti dall'equazione

$$\underset{k\times k}{A}\underset{k\times 1}{v} = \lambda \underset{k\times 1}{v}$$

- Ci sono esattamente k coppie $(\lambda_j, \underset{k\times 1}{v_j}), j = 1, \ldots, k$ che soddisfano l'equazione
- Per convenzione, gli autovalori sono ordinati in maniera decrescente:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_k$$

Autovalori e autovettori

- $\underset{k\times k}{A}$ una matrice simmetrica a valori reali
- $\underset{k\times k}{A}$ definita positiva $\Leftrightarrow$ tutti gli autovalori di $\underset{k\times k}{A}$ sono positivi , i.e. $\lambda_j > 0, j = 1, \ldots, k$
- $\underset{k\times k}{A}$ semidefinita positiva $\Leftrightarrow$ tutti gli autovalori di $\underset{k\times k}{A}$ sono non negativi, i.e. $\lambda_j \geq 0$, $j = 1, \ldots, k$
- $\underset{k\times k}{A}$ con $\mathrm{rango}(\underset{k\times k}{A}) = r \leq k$. Allora $\underset{k\times k}{A}$ ha r autovalori non nulli, e i rimanenti $k - r$ autovalori nulli
- Autovettori normalizzati $\underset{k\times 1}{v_j}$ e $\underset{k\times 1}{v_l}$ associati ad autovalori distinti $\lambda_j \neq \lambda_l$ sono perpendicolari, i.e. $\underset{1\times k}{v_j'}\underset{k\times 1}{v_l} = 0$

Teorema di Decomposizione Spettrale

Sia $\underset{k\times k}{A}$ una matrice simmetrica a valori reali. Allora $\underset{k\times k}{A}$ si può esprimere come

$$\boxed{\underset{k\times k}{A} = \underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{\Lambda}\,\underset{k\times k}{V'} = \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \underset{k\times 1}{v_j}\,\underset{1\times k}{v_j'}}$$

dove

- $\underset{k\times k}{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_k)$ è una matrice diagonale dove il j-simo elemento diagonale λ_j è il j-simo autovalore associato ad $\underset{k\times k}{A}$
- $\underset{k\times k}{V} = \left[\begin{array}{ccc} \underset{k\times 1}{v_1} & \cdots & \underset{k\times 1}{v_k} \end{array}\right]$, dove la j-sima colonna $\underset{k\times 1}{v_j}$ è il j-simo autovettore normalizzato ($\| \underset{k\times 1}{v_j} \| = 1$) associato all'autovalore λ_j
- $\underset{k\times k}{V}$ è una matrice ortogonale: $\underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{V'} = \underset{k\times k}{V'}\,\underset{k\times k}{V} = \underset{k\times k}{I}$

Esempio

$\underset{2\times 2}{A} = \begin{bmatrix} 2.2 & 0.4 \\ 0.4 & 2.8 \end{bmatrix}$ simmetrica e a valori reali. Otteniamo gli autovalori $\lambda_1 = 3$ e $\lambda_2 = 2$, a cui corrispondono gli autovalori (normalizzati) $\underset{2\times 1}{v_1} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix}$ e $\underset{2\times 1}{v_2} = \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} \\ -1/\sqrt{5} \end{bmatrix}$, quindi

$$\underset{2\times 2}{A} = 3 \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} \\ -1/\sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

Lemma

$$\boxed{\underset{k\times k}{A^q} = \underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{\Lambda^q}\,\underset{k\times k}{V'}}$$

dove $\underset{k\times k}{\Lambda}^q = \mathrm{diag}(\lambda_1^q, \ldots, \lambda_k^q)$

- Se $\underset{k\times k}{A}$ è semidefinita positiva, vale solo per $q > 0$ razionali, ovvero per $q \in \mathbb{Q}^+$
- Se $\underset{k\times k}{A}$ è definita positiva, vale anche per $q < 0$ razionali, ovvero per $q \in \mathbb{Q}^{\setminus 0}$

Applicazioni del Lemma

- $\underset{k\times k}{A^{-1}} = \underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{\Lambda^{-1}}\,\underset{k\times k}{V'}$
- $\underset{k\times k}{A^{-\frac{1}{2}}} = \underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\,\underset{k\times k}{V'}$
- $\underset{k\times k}{A^{2}} = \underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{\Lambda^{2}}\,\underset{k\times k}{V'}$
- $\underset{k\times k}{A^{\frac{1}{2}}} = \underset{k\times k}{V}\,\underset{k\times k}{\Lambda^{\frac{1}{2}}}\,\underset{k\times k}{V'}$

Decomposizione Spettrale di S

La decomposizione spettrale della matrice simmetrica $\underset{p\times p}{S}$ è

$$\underset{p\times p}{S} = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'}$$

Ricordando che $\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{V'} = \underset{p\times p}{V'}\underset{p\times p}{V} = \underset{p\times p}{I}$, otteniamo

$$\mathrm{tr}(\underset{p\times p}{S}) = \mathrm{tr}(\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'}) = \mathrm{tr}(\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'}\underset{p\times p}{V}) = \mathrm{tr}(\underset{p\times p}{\Lambda}) = \sum_{j=1}^{p}\lambda_j$$

$$\begin{aligned}\det(\underset{p\times p}{S}) &= \det(\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'}) = \det(\underset{p\times p}{V})\det(\underset{p\times p}{\Lambda})\det(\underset{p\times p}{V'}) \\ &= \det(\underset{p\times p}{\Lambda})\det(\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{V'}) = \det(\underset{p\times p}{\Lambda})\det(\underset{p\times p}{I}) = \prod_{j=1}^{p}\lambda_j\end{aligned}$$

Per le proprietà di traccia e determinante, vedi Appendice;

Outline

Matrice dei dati ortogonalizzati $\tilde{Z}$

Sia $\underset{p\times p}{S}$, la matrice di varianze/covarianze di $\underset{n\times p}{X}$, definita positiva.
Possiamo allora ottenere la matrice dei dati ortogonalizzati

$$\boxed{\underset{n\times p}{\tilde{Z}} = \underset{n\times n}{H}\,\underset{n\times p}{X}\,\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}}}$$

tale per cui

- $\underset{n\times p}{\tilde{Z}}$ ha vettore delle medie nullo $\underset{p\times 1}{0}$
- $\underset{n\times p}{\tilde{Z}}$ ha matrice di varianze/covarianze $\underset{p\times p}{S^{\tilde{Z}}} = \underset{p\times p}{I}$

Questa trasformazione lineare dei dati originali $\underset{n\times p}{X}$ si chiama *trasformazione di Mahalanobis*

Dati ortogonalizzati $\tilde{Z}$

Dimostrazione:

Il vettore delle medie di $\underset{n\times p}{\tilde{Z}}$ è

$$\frac{1}{n}\underset{p\times n}{\tilde{Z}'}\underset{n\times 1}{1} = \frac{1}{n}(\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}})'\underset{p\times n}{\tilde{X}'}\underset{n\times 1}{1} = \underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times 1}{0} = \underset{p\times 1}{0}$$

ricordando che

- il vettore delle medie di $\underset{n\times p}{\tilde{X}}$ è nullo: $\frac{1}{n}\underset{p\times n}{\tilde{X}'}\underset{n\times 1}{1} = \underset{p\times 1}{0}$
- la decomposizione spettrale di $\underset{p\times p}{S}$ è $\underset{p\times p}{S} = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'}$
- per il Lemma, abbiamo $\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}} = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'}$ simmetrica: $(\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}})' = (\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'})' = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'} = \underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}}$

Dati ortogonalizzati $\tilde{Z}$

Dimostrazione:
La matrice di varianze/covarianze di $\underset{n\times p}{\tilde{Z}}$ è

$$\begin{aligned}
\underset{p\times p}{S^{\tilde{Z}}} &= \frac{1}{n}\underset{n\times p}{\tilde{Z}'}\underset{n\times n}{H}\underset{p\times n}{\tilde{Z}} = \frac{1}{n}(\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}})'\underset{n\times p}{\tilde{X}'}\underset{n\times p}{\tilde{X}}\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}} = \underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{S}\underset{p\times p}{S^{-\frac{1}{2}}} \\
&= (\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'})(\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'})(\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'}) = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'} \\
&= \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}}\underset{p\times p}{V'} = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{\Lambda^{-1}}\underset{p\times p}{V'} = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{I}\underset{p\times p}{V'} = \underset{p\times p}{I}
\end{aligned}$$

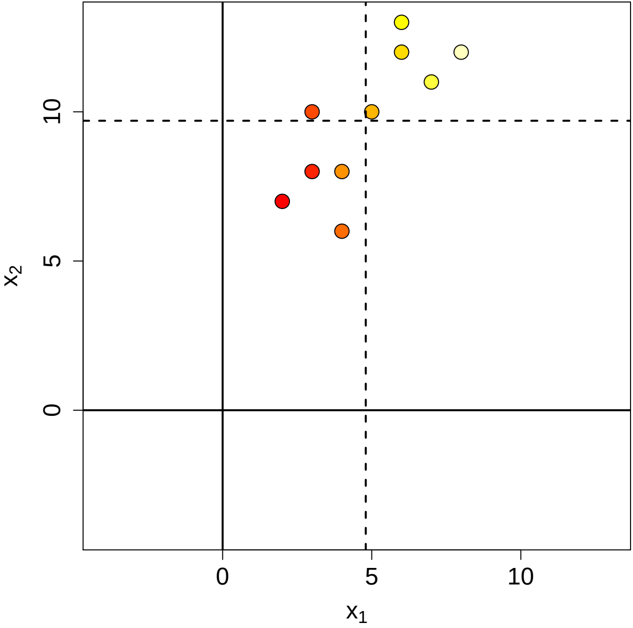
ricordando che

- $\underset{p\times p}{V}$ è una matrice ortogonale: $\underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{V'} = \underset{p\times p}{V'}\underset{p\times p}{V} = \underset{p\times p}{I}$
- $\mathrm{diag}(a_1,\ldots,a_q)\mathrm{diag}(b_1,\ldots,b_q) = \mathrm{diag}(a_1b_1,\ldots,a_qb_q) = \mathrm{diag}(b_1,\ldots,b_q)\mathrm{diag}(a_1,\ldots,a_q)$

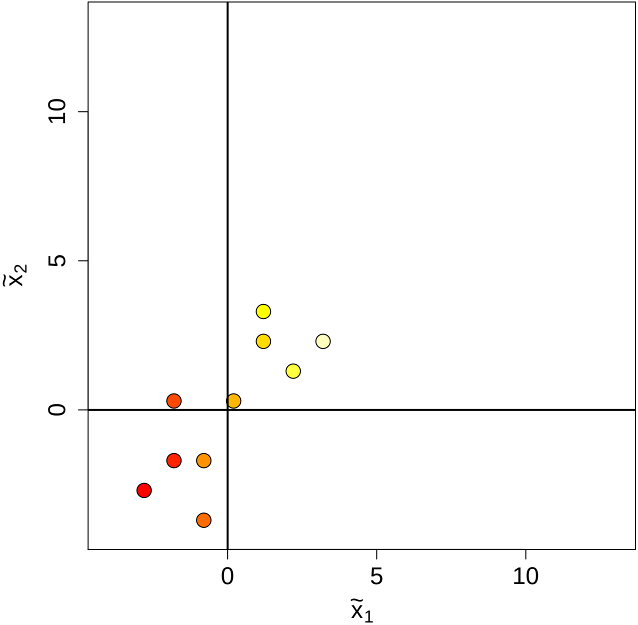
Dati ortogonalizzati $\tilde{Z}$

Matrice dei dati	Vettore delle medie	Matrice di varianze/covarianze	Matrice di correlazione
$\underset{n\times p}{X}$	$\underset{p\times 1}{\bar{x}}$	$\underset{p\times p}{S}$	$\underset{p\times p}{R}$
$\underset{n\times p}{\tilde{X}}$	$\underset{p\times 1}{0}$	$\underset{p\times p}{S^{\tilde{X}}} = \underset{p\times p}{S}$	$\underset{p\times p}{R^{\tilde{X}}} = \underset{p\times p}{R}$
$\underset{n\times p}{Z}$	$\underset{p\times 1}{0}$	$\underset{p\times p}{S^{Z}} = \underset{p\times p}{R}$	$\underset{p\times p}{R^{Z}} = \underset{p\times p}{R}$
$\underset{n\times p}{\tilde{Z}}$	$\underset{p\times 1}{0}$	$\underset{p\times p}{S^{\tilde{Z}}} = \underset{p\times p}{I}$	$\underset{p\times p}{R^{\tilde{Z}}} = \underset{p\times p}{I}$

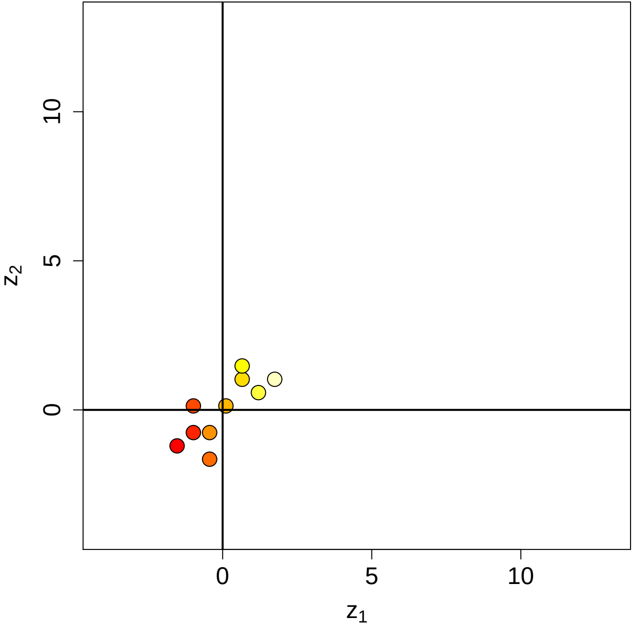
Matrice originale X



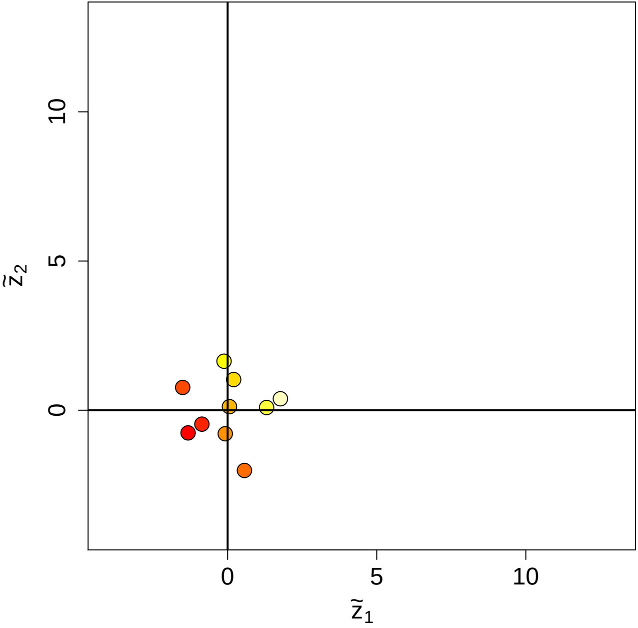
Matrice centrata $\tilde{X}$ (traslazione)



Matrice standardizzata Z (compr./dilat.)



Matrice ortogonalizzata $\tilde{Z}$ (decorrelazione)



Outline

Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

- Si possono generalizzare le idee della Decomposizione Spettrale per ottenere la Decomposizione in Valori Singolari (*Singular Value Decomposition*) di una matrice rettangolare $\underset{m\times k}{A}$, dove:
- i vettori della SVD di $\underset{m\times k}{A}$ sono gli autovettori normalizzati delle matrici simmetriche $\underset{k\times m}{A'}\underset{m\times k}{A}$ e $\underset{m\times k}{A}\underset{k\times m}{A'}$
- i valori della SVD di $\underset{m\times k}{A}$ sono la radice quadrata degli autovalori delle matrici simmetriche $\underset{k\times m}{A'}\underset{m\times k}{A}$ (o $\underset{m\times k}{A}\underset{k\times m}{A'}$)

Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

Sia $\underset{m\times k}{A}$ una matrice rettangolare a valori reali. Allora esiste una matrice ortogonale $\underset{m\times m}{U}$ e una matrice ortogonale $\underset{k\times k}{V}$ tali che

$$\boxed{\underset{m\times k}{A} = \underset{m\times m}{U}\underset{m\times k}{\Delta}\underset{k\times k}{V'} = \sum_{j=1}^{\min(m,k)} \delta_j \underset{m\times 1}{u_j}\underset{1\times k}{v_j'}}$$

dove la matrice $\underset{m\times k}{\Delta}$ ha elemento di posizione (j,j) pari a $\delta_j \geq 0$ per $j = 1, \ldots, \min(m,k)$ e gli altri elementi pari a 0.

Le costanti $\delta_1 \geq \ldots \geq \delta_{\min(m,k)}$ sono dette *valori singolari* di $\underset{m\times k}{A}$.

Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

- Sia $\underset{m\times k}{A}$ con $\mathrm{rango}(\underset{m\times k}{A}) = r \leq \min(m, k)$.
- Le k colonne di $\underset{k\times k}{V}$ sono gli autovettori di $\underset{k\times m}{A'}\underset{m\times k}{A}$

$$\underset{k\times m}{A'}\underset{m\times k}{A} = \underset{k\times k}{V}\underset{k\times m}{\Delta'}\underset{m\times m}{U'}\underset{m\times m}{U}\underset{m\times k}{\Delta}\underset{k\times k}{V'} = \underset{k\times k}{V}\underset{k\times m}{\Delta'}\underset{m\times k}{\Delta}\underset{k\times k}{V'}$$

$$= \underset{k\times k}{V}\begin{bmatrix} \underset{r\times r}{\Delta_r^2} & \underset{r\times(k-r)}{0} \\ \underset{(k-r)\times r}{0} & \underset{(k-r)\times(k-r)}{0} \end{bmatrix}\underset{k\times k}{V'} = \underset{k\times k}{V^{A'A}}\underset{k\times k}{\Lambda^{A'A}}(\underset{k\times k}{V^{A'A}})'$$

- Le m colonne di $\underset{m\times m}{U}$ sono gli autovettori di $\underset{m\times k}{A}\underset{k\times m}{A'}$

$$\underset{m\times k}{A}\underset{k\times m}{A'} = \underset{m\times m}{U}\underset{m\times k}{\Delta}\underset{k\times k}{V'}\underset{k\times k}{V}\underset{k\times m}{\Delta'}\underset{m\times m}{U'} = \underset{m\times m}{U}\underset{m\times k}{\Delta}\underset{k\times m}{\Delta'}\underset{m\times m}{U'}$$

$$= \underset{m\times m}{U}\begin{bmatrix} \underset{r\times r}{\Delta_r^2} & \underset{r\times(m-r)}{0} \\ \underset{(m-r)\times r}{0} & \underset{(m-r)\times(m-r)}{0} \end{bmatrix}\underset{m\times m}{U'} = \underset{m\times m}{V^{AA'}}\underset{m\times m}{\Lambda^{AA'}}(\underset{m\times m}{V^{AA'}})'$$

Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

- Sia $\underset{m\times k}{A}$ con $\mathrm{rango}(\underset{m\times k}{A}) = r \leq \min(m,k)$.
- $\underset{r\times r}{\Delta_r^2} = \mathrm{diag}(d_1^2, \ldots, d_r^2)$ i cui elementi diagonali sono gli r autovalori non nulli $\lambda_1^{A'A} \geq \lambda_2^{A'A} \geq \ldots \geq \lambda_r^{A'A} > 0$ di $\underset{k\times m}{A'}\underset{m\times k}{A}$ (o di $\underset{m\times k}{A}\underset{k\times m}{A'}$)

Possiamo scrivere

$$\boxed{\underset{m\times k}{A} = \underset{m\times m}{U}\underset{m\times k}{\Delta}\underset{k\times k}{V'} = \underset{m\times r}{U_r}\underset{r\times r}{\Delta_r}\underset{r\times k}{V_r'} = \sum_{j=1}^{r} \delta_j \underset{m\times 1}{u_j}\underset{1\times k}{v_j'}}$$

con

- $\underset{m\times r}{U_r} = \left[\begin{array}{ccc} \underset{m\times 1}{u_1} & \cdots & \underset{m\times 1}{u_r} \end{array}\right]$
- $\underset{k\times r}{V_r} = \left[\begin{array}{ccc} \underset{k\times 1}{v_1} & \cdots & \underset{k\times 1}{v_r} \end{array}\right]$
- $\underset{r\times r}{\Delta_r} = \mathrm{diag}(\delta_1, \ldots, \delta_r)$ con $\delta_j > 0$

Matrice di varianze/covarianze S

- Decomposizione spettrale di $\underset{p\times p}{S}$

$$\underset{p\times p}{S} = \underset{p\times p}{V}\underset{p\times p}{\Lambda}\underset{p\times p}{V'}$$

- Decomposizione in valori singolari di $\underset{n\times p}{\tilde{X}}$

$$\underset{n\times p}{\tilde{X}} = \underset{n\times n}{U}\underset{n\times p}{\Delta}\underset{p\times p}{V'}$$

- Decomposizione in valori singolari di $\underset{p\times p}{S}$

$$S = \frac{1}{n}\tilde{X}'\tilde{X} = \frac{1}{n}V\Delta U'U\Delta V' = V\frac{1}{n}\Delta^2 V'$$