Forelæsning 12:
Anvendelser af egenværdier og egenvektorer

LinAlgDat 2021/2022

Henrik Holm og Henrik L. Pedersen
Institut for Matematiske Fag
holm@math.ku.dk og henrikp@math.ku.dk

Oversigt

Dynamiske systemer

Et dynamisk system består af:

- En følge $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots$ af tilstandsvektorer. Vektoren $\mathbf{x}_t$ beskriver den tilstand systemet befinder sig i til tidspunktet t.
- En udviklingsregel der beskriver hvordan systemet udvikler sig fra et tidspunkt (t) til det næste ($t+1$). Vi betragter situationen

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_t \qquad \text{hvor} \qquad \mathbf{A} \text{ er en matrix.}$$

Eksempel (Sæler og fisk) 1/11

Systemet og dets tilstandsvektorer. I et vist havområde betragtes

$$s_t = \text{antal sæler (målt i tusinder) i år } t$$
$$f_t = \text{antal fisk (målt i tons) i år } t$$

Vi betegner med $\mathbf{x}_t$ (tilstands)vektoren

$$\mathbf{x}_t = \begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix}.$$

Eksempel (Sæler og fisk) 2/11

Udviklingsreglen. Sælerne og fiskene udvikler sig som følger:

$$\begin{cases} s_{t+1} = 0.60 s_t + 0.50 f_t \\ f_{t+1} = -0.24 s_t + 1.40 f_t \end{cases}$$

Fortolkning af koefficienterne.

- Uden fisk ($f_t = 0$) falder sælbestanden 40% pr år fordi så vil
$$s_{t+1} = 0.60 s_t\,.$$
Mængden af fisk i år t bidrager $+0.5 f_t$ til sælbestanden året efter.
- Uden sæler ($s_t = 0$) vokser fiskemængden 40% pr år fordi så vil
$$f_{t+1} = 1.40 f_t\,.$$
Antal af sæler i år t bidrager $-0.24 s_t$ til fiskemængden året efter.

Udviklingsreglen på matrixform.

$$\begin{pmatrix} s_{t+1} \\ f_{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix} \qquad \text{dvs.} \qquad \mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_t$$

Eksempel (Sæler og fisk) 3/11

Startpopulation. Antag, at der i år $t = 0$ er

$$\begin{aligned} s_0 &= 500 \text{ (tusind) sæler} \\ f_0 &= 300 \text{ (tons) fisk} \end{aligned} \qquad \text{dvs.} \qquad \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} s_0 \\ f_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 500 \\ 300 \end{pmatrix}.$$

Fremskrivning. Vi bruger udviklingsreglen

$$\begin{pmatrix} s_{t+1} \\ f_{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix} \qquad \text{dvs.} \qquad \mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_t$$

til at bestemme sælbestanden og fiskemængden i år $t = 1, 2, \ldots$.

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 500 \\ 300 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 450 \\ 300 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{A}\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 450 \\ 300 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 420 \\ 312 \end{pmatrix}$$

I afrundede tal fås:

År	0	1	2	3	4	⋯	17	18	19	20
Sæler	500	450	420	408	413	⋯	2782	3335	3999	4797
Fisk	300	300	312	336	372	⋯	3331	3996	4794	5752

Eksempel (Sæler og fisk) 4/11

Vækst. Sælbestanden og fiskemængden vokser uhæmmet:

År	0	1	2	3	4	⋯	17	18	19	20
Sæler	500	450	420	408	413	⋯	2782	3335	3999	4797
Fisk	300	300	312	336	372	⋯	3331	3996	4794	5752

Lad os udregne vækstraterne for sæler og fisk fra et år til det næste:

$$\begin{aligned}
\frac{s_1}{s_0} &= \frac{450}{500} \simeq 0.9000 & \frac{f_1}{f_0} &= \frac{300}{300} \simeq 1.0000 \\
\frac{s_2}{s_1} &= \frac{420}{450} \simeq 0.9333 & \frac{f_2}{f_1} &= \frac{312}{300} \simeq 1.0400 \\
\frac{s_3}{s_2} &= \frac{408}{420} \simeq 0.9714 & \frac{f_3}{f_2} &= \frac{336}{312} \simeq 1.0769 \\
&\vdots & &\vdots \\
\frac{s_{19}}{s_{18}} &= \frac{3999}{3335} \simeq 1.1992 & \frac{f_{19}}{f_{18}} &= \frac{4794}{3996} \simeq 1.1997 \\
\frac{s_{20}}{s_{19}} &= \frac{4797}{3999} \simeq 1.1995 & \frac{f_{20}}{f_{19}} &= \frac{5752}{4794} \simeq 1.1998
\end{aligned}$$

Eksempel (Sæler og fisk) 5/11

Konklusion. Med en startpopulation på

$$\begin{aligned} s_0 &= 500 \text{ (tusind) sæler} \\ f_0 &= 300 \text{ (tons) fisk} \end{aligned} \qquad \text{dvs.} \qquad \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} s_0 \\ f_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 500 \\ 300 \end{pmatrix}$$

vil de årlige vækstrater for sæler og fisk stabilisere sig omkring 1.2.

$$\frac{s_{t+1}}{s_t} \longrightarrow 1.2 \quad \text{og} \quad \frac{f_{t+1}}{f_t} \longrightarrow 1.2 \qquad \text{for} \qquad t \longrightarrow \infty .$$

I længden vokser sælbestanden og fiskemængden med 20% pr år.

Spørgsmål. Er der en (matematisk) forklaring på dette fænomen?

Eksempel (Sæler og fisk) 6/11

Ny startpopulation. Antag, at der i år $t = 0$ er

$$\begin{aligned} s_0 &= 500 \text{ (tusind) sæler} \\ f_0 &= 200 \text{ (tons) fisk} \end{aligned} \qquad \text{dvs.} \qquad \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} s_0 \\ f_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 500 \\ 200 \end{pmatrix}.$$

Ny fremskrivning. Som før finder vi

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{A}\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 500 \\ 200 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 400 \\ 160 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{A}\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 400 \\ 160 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 320 \\ 128 \end{pmatrix}$$

I afrundede tal fås:

År	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Sæler	500	400	320	256	205	164	131	105	84	67	54
Fisk	200	160	128	102	82	66	52	42	34	27	21

Denne gang går tallene mod nul.

Eksempel (Sæler og fisk) 7/11

Ny konklusion. Med en startpopulation på

$$\begin{aligned} s_0 &= 500 \text{ (tusind) sæler} \\ f_0 &= 200 \text{ (tons) fisk} \end{aligned} \qquad \text{dvs.} \qquad \mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} s_0 \\ f_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 500 \\ 200 \end{pmatrix}$$

vil

$$s_t \longrightarrow 0 \quad \text{og} \quad f_t \longrightarrow 0 \quad \text{for} \quad t \longrightarrow \infty .$$

Dvs. i længden vil sælbestanden og fiskebestanden uddø!

Nyt spørgsmål. Er der en forklaring på dette fænomen?

Eksempel (Sæler og fisk) 8/11

Teoretiske overvejelser. Matricen

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0.60 & 0.50 \\ -0.24 & 1.40 \end{pmatrix}$$

har

- egenværdi $\lambda_1 = 1.2$ med tilhørende egenvektor $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}$.
- egenværdi $\lambda_2 = 0.8$ med tilhørende egenvektor $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$.

Da $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$ er en basis for $\mathbb{R}^2$ kan enhver startvektor $\mathbf{x}_0$ skrives

$$\mathbf{x}_0 = c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 \qquad \text{hvor} \qquad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

Fx gælder

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 500 \\ 300 \end{pmatrix} = 25\begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + 75\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 500 \\ 200 \end{pmatrix} = 0\begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + 100\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Eksempel (Sæler og fisk) 9/11

Teoretiske overvejelser (fortsat). Der gælder

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_2 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_1 = \mathbf{A}(\mathbf{A}\mathbf{x}_0) = \mathbf{A}^2\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}_3 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_2 = \mathbf{A}(\mathbf{A}^2\mathbf{x}_0) = \mathbf{A}^3\mathbf{x}_0 \end{aligned}$$

og generelt

$$\mathbf{x}_t = \mathbf{A}^t\mathbf{x}_0 .$$

Med $\mathbf{x}_0 = c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2$ fås nu

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_t &= \mathbf{A}^t\mathbf{x}_0 \\ &= \mathbf{A}^t(c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2) \\ &= c_1\mathbf{A}^t\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{A}^t\mathbf{v}_2 \\ &= c_1\lambda_1^t\mathbf{v}_1 + c_2\lambda_2^t\mathbf{v}_2 . \end{aligned}$$

Vi har altså den generelle formel:

$$\begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix} = c_1 \cdot 1.2^t \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + c_2 \cdot 0.8^t \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5c_1 \cdot 1.2^t + 5c_2 \cdot 0.8^t \\ 6c_1 \cdot 1.2^t + 2c_2 \cdot 0.8^t \end{pmatrix} .$$

Eksempel (Sæler og fisk) 10/11

Forklaring på første fænomen. Startpopulationen

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 500 \\ 300 \end{pmatrix} = 25\begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + 75\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

svarer til $c_1 = 25$ og $c_2 = 75$. Ved indsættes i den generelle formel fås

$$\begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 125 \cdot 1.2^t + 375 \cdot 0.8^t \\ 150 \cdot 1.2^t + 150 \cdot 0.8^t \end{pmatrix} \qquad \text{for alle } t.$$

Da $0.8^t \to 0$ for $t \to \infty$ gælder

$$\begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 125 \cdot 1.2^t \\ 150 \cdot 1.2^t \end{pmatrix} \qquad \text{for store værdier af } t.$$

For store værdier af t er vækstraterne for sæler og fisk derfor

$$\frac{s_{t+1}}{s_t} \simeq \frac{125 \cdot 1.2^{t+1}}{125 \cdot 1.2^t} = 1.2 \qquad \text{og} \qquad \frac{f_{t+1}}{f_t} \simeq \frac{150 \cdot 1.2^{t+1}}{150 \cdot 1.2^t} = 1.2 .$$

Vi har forklaret det første observerede fænomen!

Bemærkning. Den dominerende egenværdi – her $\lambda_1 = 1.2$, som er numerisk større end $\lambda_2 = 0.8$ – kan altså fortolkes som en vækstrate.

Eksempel (Sæler og fisk) 11/11

Forklaring på andet fænomen. Startpopulationen

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 500 \\ 200 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} + 100 \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}$$

svarer til $c_1 = 0$ og $c_2 = 100$. Ved indsættes i den generelle formel fås

$$\begin{pmatrix} s_t \\ f_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 500 \cdot 0.8^t \\ 200 \cdot 0.8^t \end{pmatrix} \qquad \text{for alle } t.$$

Da $0.8^t \to 0$ for $t \to \infty$ gælder

$$s_t = 500 \cdot 0.8^t \longrightarrow 0 \qquad \text{og} \qquad f_t = 200 \cdot 0.8^t \longrightarrow 0\,.$$

Vi har forklaret det andet observerede fænomen!

Markovkæder

En Markovkæde er et særligt dynamisk system der opstår ud fra tilstande og overgangssandsynligheder. Mere præcist:

Betragt et system der kan være i n forskellige tilstande:

$$O_1, O_2, \ldots, O_n.$$

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 1/8

System. En vilkårlig datalog.

Tilstande. Datalogen kan arbejde i et af tre konkurrerende computerfirmaer A, B eller C. Der er altså tre mulige tilstande:

- Datalogen arbejder i firma A.
- Datalogen arbejder i firma B.
- Datalogen arbejder i firma C.

Over tid skifter systemet mellem de forskellige tilstande. Når systemet er i tilstand O_j er der en vis overgangssandsynlighed p_{ij} for at systemet skifter til tilstand O_i.

Til\Fra	O_1	O_2	$\cdots$	O_n
O_1	p_{11}	p_{12}	$\cdots$	p_{1n}
O_2	p_{21}	p_{22}	$\cdots$	p_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
O_n	p_{n1}	p_{n2}	$\cdots$	p_{nn}

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 2/8

Overgangssandsynligheder. Hvert år er der følgende sandsynligheder for at datalogen tager arbejde i et af de andre computerfirmaer:

Til\Fra	A	B	C
A	0.6	0.2	0.4
B	0.2	0.6	0.4
C	0.2	0.2	0.2

Så hvis datalogen i et givet år arbejder i firma A, så er der 20% chance for, at han året efter tager arbejde i firma B.

Overgangssandsynlighederne

Til\Fra	O_1	O_2	$\cdots$	O_n
O_1	p_{11}	p_{12}	$\cdots$	p_{1n}
O_2	p_{21}	p_{22}	$\cdots$	p_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
O_n	p_{n1}	p_{n2}	$\cdots$	p_{nn}

giver $\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix}$

Matricen $\mathbf{P}$ kaldes overgangsmatricen.

Den er et eksempel på en stokastisk matrix, hvilket betyder at hver søjle i $\mathbf{P}$ består af ikke-negative tal som summer til 1 (Definition 6.10).

Andet eksempel: Linkmatricen fra *"Googles page ranking"*.

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 3/8

Overgangsmatricen.

Til\Fra	A	B	C
A	0.6	0.2	0.4
B	0.2	0.6	0.4
C	0.2	0.2	0.2

giver $\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 & 0.4 \\ 0.2 & 0.6 & 0.4 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}$

Definition 6.12 (Regulær stokastisk matrix)

En stokastisk matrix $\mathbf{P}$ kaldes regulær hvis der findes et $k > 0$ således, at $\mathbf{P}^k$ kun har strengt positive indgange.

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 4/8

Den stokastiske matrix

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 & 0.4 \\ 0.2 & 0.6 & 0.4 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}$$

er regulær idet $\mathbf{P}^1 = \mathbf{P}$ kun har strengt positive indgange.

Theorem 6.9 (Konvergens) – *kun nogle af udsagnene*

Lad $\mathbf{P}$ være en regulær stokastisk matrix. Da gælder:

- $\lambda = 1$ er en egenværdi for $\mathbf{P}$.
- For en vilkårlig vektor $\mathbf{u}_0 \neq \mathbf{0}$ vil $\mathbf{P}^k\mathbf{u}_0$ konvergere (gå) mod en egenvektor hørende til egenværdien $\lambda = 1$ (en ligevægt), dvs.

$$\mathbf{P}^k\mathbf{u}_0 \longrightarrow \mathbf{w} \quad \text{for} \quad k \longrightarrow \infty \qquad \text{hvor} \qquad \mathbf{P}\mathbf{w} = \mathbf{w}.$$

Theorem 6.9 giver en måde hvorpå man kan beregne en egenvektor for $\mathbf{P}$ (hørende til $\lambda = 1$) uden fx at skulle løse ligninger:

Man udregner fx blot $\mathbf{P}^k\mathbf{e}_1$ for høje potenser k.

Hvis $\mathbf{P}$ er *stor*, så er det den eneste måde man i praksis kan finde en egenvektor. Det er essentielt sådan Google finder frem til deres page ranking.

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 5/8

Vi har 150 dataloger der i år $t = 0$ er fordelt således:

- Firma A har $x_0 = 60$ medarbejdere.
- Firma B har $y_0 = 50$ medarbejdere.
- Firma C har $z_0 = 40$ medarbejdere.

Sæt

$$\begin{aligned} x_t &= \text{antal medarbejdere i firma A i år } t \\ y_t &= \text{antal medarbejdere i firma B i år } t \\ z_t &= \text{antal medarbejdere i firma C i år } t \end{aligned}$$

og

$$\mathbf{u}_t = \begin{pmatrix} x_t \\ y_t \\ z_t \end{pmatrix}.$$

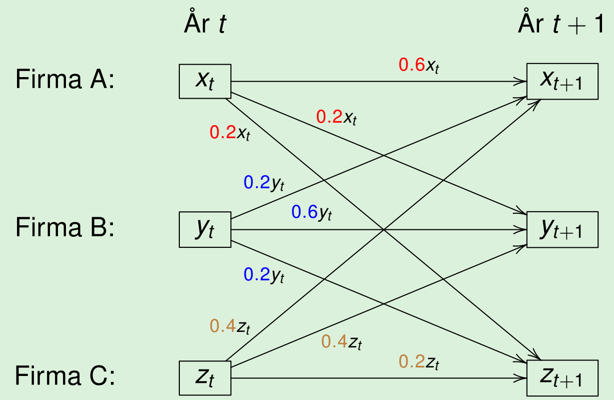
Spørgsmål. Hvordan fordeler arbejdskraften sig i det lange løb?

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 6/8

Til \ Fra	A	B	C
A	0.6	0.2	0.4
B	0.2	0.6	0.4
C	0.2	0.2	0.2

giver

$$\begin{aligned} x_{t+1} &= 0.6x_t + 0.2y_t + 0.4z_t \\ y_{t+1} &= 0.2x_t + 0.6y_t + 0.4z_t \\ z_{t+1} &= 0.2x_t + 0.2y_t + 0.2z_t \end{aligned}$$



Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 7/8

Disse ligninger:

$$\begin{aligned} x_{t+1} &= 0.6x_t + 0.2y_t + 0.4z_t \\ y_{t+1} &= 0.2x_t + 0.6y_t + 0.4z_t \\ z_{t+1} &= 0.2x_t + 0.2y_t + 0.2z_t \end{aligned}$$

skrives nu på matrixform:

$$\begin{pmatrix} x_{t+1} \\ y_{t+1} \\ z_{t+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 & 0.4 \\ 0.2 & 0.6 & 0.4 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_t \\ y_t \\ z_t \end{pmatrix}.$$

Dvs. vi har udviklingsreglen:

$$\mathbf{u}_{t+1} = \mathbf{P}\mathbf{u}_t \,.$$

Eksempel (Bevægelse af arbejdskraft) 8/8

Theorem 6.9 forudsiger, at arbejdsstyrken på 150 dataloger med tiden vil stabilisere sig mod en ligevægt **w**, der kan beregnes som

$$\mathbf{w} \simeq \mathbf{P}^k\mathbf{u}_0 \qquad \text{hvor} \qquad k \text{ er stor.}$$

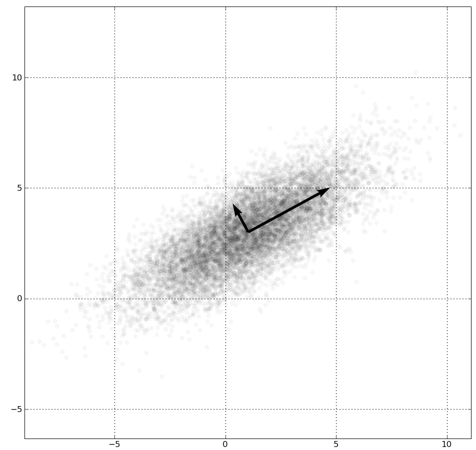
Faktisk giver allerede $k = 5$ et godt estimat:

$$\mathbf{w} \simeq \mathbf{P}^5\mathbf{u}_0 = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.2 & 0.4 \\ 0.2 & 0.6 & 0.4 \\ 0.2 & 0.2 & 0.2 \end{pmatrix}^5 \begin{pmatrix} 60 \\ 50 \\ 40 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 60.05 \\ 59.95 \\ 30.00 \end{pmatrix}.$$

I det lange løb vil der altså konstant være:

- 60 medarbejdere i firma A (men ikke de samme hele tiden)
- 60 medarbejdere i firma B (men ikke de samme hele tiden)
- 30 medarbejdere i firma C (men ikke de samme hele tiden)

Principal Component Analysis (PCA)

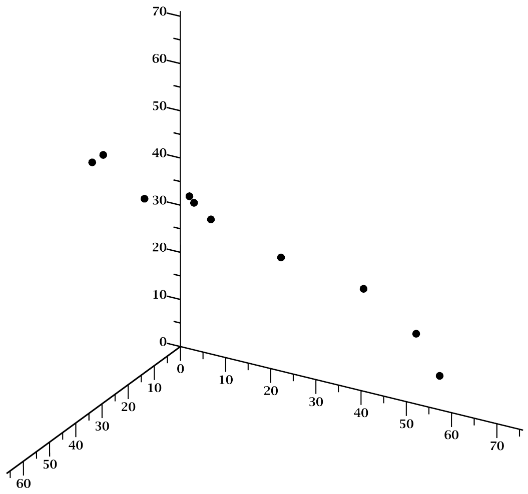


http://en.wikipedia.org/wiki/Principal_component_analysis

Vi har givet et 3-dimensionalt datasæt med $n = 10$ observationer:

Observation	1. karakteristika	2. karakteristika	3. karakteristika
1	39.9	75.1	36.4
2	60.1	37.8	63.5
3	47.0	67.6	47.0
4	64.1	20.1	71.1
5	66.4	19.0	70.2
6	61.7	37.7	65.5
7	61.0	27.4	62.3
8	48.9	50.5	50.4
9	58.5	40.6	60.0
10	32.1	75.8	24.5

Illustration. De $n = 10$ punkter fra datasættet.



Dvs. punkterne $(39.9, 75.1, 36.4)$, $(60.1, 37.8, 63.5)$, ...

Mål. Vi vil lave en Principal Component Analysis på datasættet.

Hvad betyder det? Løst sagt vil vi bestemme de retninger som datasættet "peger mest og mindst i".

Hvorfor er det nyttigt? Det tillader fx en at reducere datasættet (såkaldt dimension reduction) på en intelligent måde og dermed:

- Spare lagerplads når datasættet skal gemmes på hard disken.
- Udføre beregninger med datasættet hurtigere end normalt.

Datasættet opstilles i en matrix.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 39.9 & 75.1 & 36.4 \\ 60.1 & 37.8 & 63.5 \\ 47.0 & 67.6 & 47.0 \\ 64.1 & 20.1 & 71.1 \\ 66.4 & 19.0 & 70.2 \\ 61.7 & 37.7 & 65.5 \\ 61.0 & 27.4 & 62.3 \\ 48.9 & 50.5 & 50.4 \\ 58.5 & 40.6 & 60.0 \\ 32.1 & 75.8 & 24.5 \end{pmatrix}.$$

De tre søjlegennemsnit er hhv.

$$m_1 = 53.97 \qquad m_2 = 45.16 \qquad m_3 = 55.09$$

Datasættet parallelforskydes så det centreres om $(0, 0, 0)$**.** Dvs.

- Fra alle tal i første søjle i **X** trækkes $m_1 = 53.97$
- Fra alle tal i anden søjle i **X** trækkes $m_2 = 45.16$
- Fra alle tal i tredje søjle i **X** trækkes $m_3 = 55.09$

For at gøre dette sættes først

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \\ 53.97 & 45.16 & 55.09 \end{pmatrix}.$$

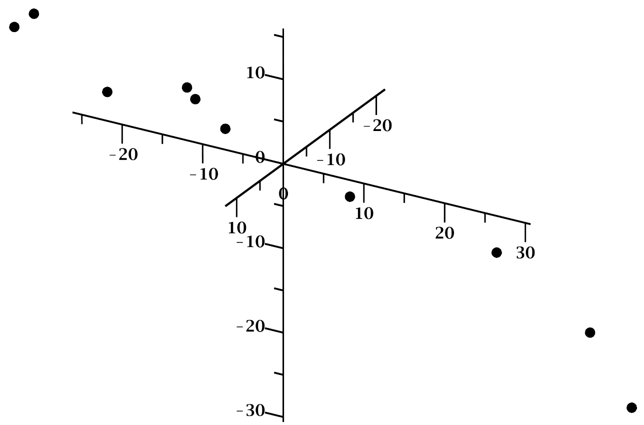
Bemærk, at matricen **M** kun er bygget op af (gentagelser af) tre tal.

Og det parallelforskudte datasæt **Y** er nu givet ved:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} - \mathbf{M} = \begin{pmatrix} -14.07 & 29.94 & -18.69 \\ 6.13 & -7.36 & 8.41 \\ -6.97 & 22.44 & -8.09 \\ 10.13 & -25.06 & 16.01 \\ 12.43 & -26.16 & 15.11 \\ 7.73 & -7.46 & 10.41 \\ 7.03 & -17.76 & 7.21 \\ -5.07 & 5.34 & -4.69 \\ 4.53 & -4.56 & 4.91 \\ -21.87 & 30.64 & -30.59 \end{pmatrix}.$$

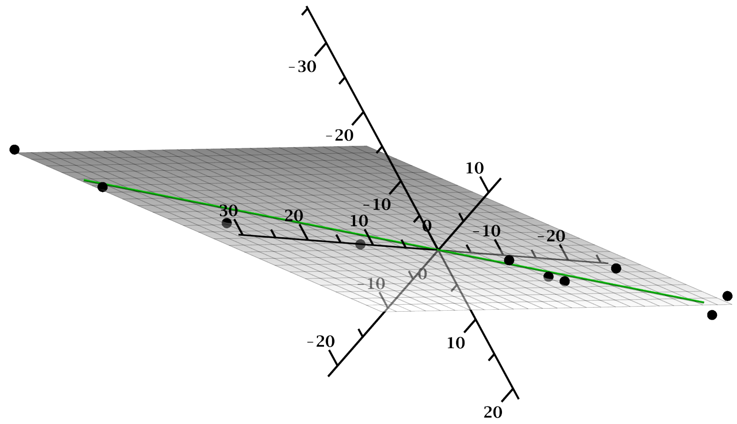
I matricen **Y** er hvert søjlegennemsnit lig med 0.

Illustration (første synsvinkel). Punkterne fra datasættet **Y**.



Datapunkterne i **Y** er centreret omkring $(0, 0, 0)$.

Illustration (anden synsvinkel). Punkterne fra datasættet **Y**,



samt de “bedste” approksimationer med hhv.

- En linie (et 1-dimensionalt underrum)
- En plan (et 2-dimensionalt underrum)

PCA finder disse “bedste” approksimationer.

Næste skridt i PCA er at udregne matricen

$$\mathbf{Y}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} 1174.94 & -2102.15 & 1567.09 \\ -2102.15 & 4125.66 & -2789.92 \\ 1567.09 & -2789.92 & 2112.33 \end{pmatrix}.$$

Matricen $\mathbf{Y}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y}$ er *symmetrisk*, så ifølge *spektralsætningen* er den ortogonalt diagonalisérbar.

Egenværdier og egenvektorer for $\mathbf{Y}^{\mathsf{T}}\mathbf{Y}$ bestemmes:

$$\lambda_1 = 7221.24 \qquad \lambda_2 = 184.73 \qquad \lambda_3 = 6.96$$

$$\mathbf{p}_1 = \begin{pmatrix} -0.40 \\ 0.75 \\ -0.53 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{p}_2 = \begin{pmatrix} 0.39 \\ 0.66 \\ 0.64 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{p}_3 = \begin{pmatrix} 0.83 \\ 0.05 \\ -0.55 \end{pmatrix}$$

Grøn er vigtigere end gul, som er vigtigere end rød, fordi

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3.$$

Matricen

$$\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2|\mathbf{p}_3) = \begin{pmatrix} -0.40 & 0.39 & 0.83 \\ 0.75 & 0.66 & 0.05 \\ -0.53 & 0.64 & -0.55 \end{pmatrix}$$

er altså en diagonaliserende matrix for $\mathbf{Y}^\mathsf{T}\mathbf{Y}$, og den er *ortogonal* fordi

$$\mathbf{P}^\mathsf{T}\mathbf{P} = \mathbf{I} = \mathbf{P}\mathbf{P}^\mathsf{T}.$$

Vektorerne $\mathcal{B} = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$ er altså en *ortonormal basis* for $\mathbb{R}^3$.

Næste skridt i PCA er at udregne *koordinaterne* for datapunkterne i

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \hline \mathbf{y}_2 \\ \hline \mathbf{y}_3 \\ \hline \mathbf{y}_4 \\ \hline \mathbf{y}_5 \\ \hline \mathbf{y}_6 \\ \hline \mathbf{y}_7 \\ \hline \mathbf{y}_8 \\ \hline \mathbf{y}_9 \\ \hline \mathbf{y}_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -14.07 & 29.94 & -18.69 \\ 6.13 & -7.36 & 8.41 \\ -6.97 & 22.44 & -8.09 \\ 10.13 & -25.06 & 16.01 \\ 12.43 & -26.16 & 15.11 \\ 7.73 & -7.46 & 10.41 \\ 7.03 & -17.76 & 7.21 \\ -5.07 & 5.34 & -4.69 \\ 4.53 & -4.56 & 4.91 \\ -21.87 & 30.64 & -30.59 \end{pmatrix}$$

mht. basen $\mathcal{B} = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$.

Koordinaterne for rækkevektoren $\mathbf{y}_i$ mht. basen $\mathcal{B} = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$ er

$$[\mathbf{y}_i]_\mathcal{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_i\mathbf{p}_1 \\ \mathbf{y}_i\mathbf{p}_2 \\ \mathbf{y}_i\mathbf{p}_3 \end{pmatrix}.$$

(Matrixproduktet $\mathbf{y}_i\mathbf{p}_j$ er netop skalarproduktet af vektorerne $\mathbf{y}_i$ og $\mathbf{p}_j$.)

Bemærk, at $[\mathbf{y}_i]_\mathcal{B}$ netop er den i'te række i matricen

$$\mathbf{C} := \mathbf{Y}\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \hline \mathbf{y}_2 \\ \hline \mathbf{y}_3 \\ \hline \mathbf{y}_4 \\ \hline \mathbf{y}_5 \\ \hline \mathbf{y}_6 \\ \hline \mathbf{y}_7 \\ \hline \mathbf{y}_8 \\ \hline \mathbf{y}_9 \\ \hline \mathbf{y}_{10} \end{pmatrix} (\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2|\mathbf{p}_3) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_1\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_1\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_2\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_2\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_2\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_3\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_3\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_3\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_4\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_4\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_4\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_5\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_5\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_5\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_6\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_6\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_6\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_7\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_7\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_7\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_8\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_8\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_8\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_9\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_9\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_9\mathbf{p}_3 \\ \hline \mathbf{y}_{10}\mathbf{p}_1 & \mathbf{y}_{10}\mathbf{p}_2 & \mathbf{y}_{10}\mathbf{p}_3 \end{pmatrix}.$$

Vi udregner nu denne matrix:

$$\mathbf{C} := \mathbf{Y}\mathbf{P} = \begin{pmatrix} -14.07 & 29.94 & -18.69 \\ 6.13 & -7.36 & 8.41 \\ -6.97 & 22.44 & -8.09 \\ 10.13 & -25.06 & 16.01 \\ 12.43 & -26.16 & 15.11 \\ 7.73 & -7.46 & 10.41 \\ 7.03 & -17.76 & 7.21 \\ -5.07 & 5.34 & -4.69 \\ 4.53 & -4.56 & 4.91 \\ -21.87 & 30.64 & -30.59 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.40 & 0.39 & 0.83 \\ 0.75 & 0.66 & 0.05 \\ -0.53 & 0.64 & -0.55 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0.13 \\ -12.41 & 2.91 & 0.08 \\ 23.86 & 6.94 & -0.20 \\ -31.28 & -2.36 & -1.68 \\ -32.54 & -2.78 & 0.68 \\ -14.18 & 4.75 & 0.30 \\ -19.91 & -4.39 & 0.97 \\ 8.50 & -1.44 & -1.36 \\ -7.82 & 1.89 & 0.83 \\ 47.87 & -7.86 & 0.25 \end{pmatrix}.$$

Vi har:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \hline \mathbf{y}_2 \\ \hline \mathbf{y}_3 \\ \hline \mathbf{y}_4 \\ \hline \mathbf{y}_5 \\ \hline \mathbf{y}_6 \\ \hline \mathbf{y}_7 \\ \hline \mathbf{y}_8 \\ \hline \mathbf{y}_9 \\ \hline \mathbf{y}_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -14.07 & 29.94 & -18.69 \\ 6.13 & -7.36 & 8.41 \\ -6.97 & 22.44 & -8.09 \\ 10.13 & -25.06 & 16.01 \\ 12.43 & -26.16 & 15.11 \\ 7.73 & -7.46 & 10.41 \\ 7.03 & -17.76 & 7.21 \\ -5.07 & 5.34 & -4.69 \\ 4.53 & -4.56 & 4.91 \\ -21.87 & 30.64 & -30.59 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0.13 \\ -12.41 & 2.91 & 0.08 \\ 23.86 & 6.94 & -0.20 \\ -31.28 & -2.36 & -1.68 \\ -32.54 & -2.78 & 0.68 \\ -14.18 & 4.75 & 0.30 \\ -19.91 & -4.39 & 0.97 \\ 8.50 & -1.44 & -1.36 \\ -7.82 & 1.89 & 0.83 \\ 47.87 & -7.86 & 0.25 \end{pmatrix}$$

Og derfor gælder:

$$\mathbf{y}_1 = \begin{pmatrix} -14.07 \\ 29.94 \\ -18.69 \end{pmatrix} = 37.92\mathbf{p}_1 + 2.35\mathbf{p}_2 + 0.13\mathbf{p}_3$$

$$\mathbf{y}_2 = \begin{pmatrix} 6.13 \\ -7.36 \\ 8.41 \end{pmatrix} = -12.41\mathbf{p}_1 + 2.91\mathbf{p}_2 + 0.08\mathbf{p}_3$$

etc.

I matricen

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0.13 \\ -12.41 & 2.91 & 0.08 \\ 23.86 & 6.94 & -0.20 \\ -31.28 & -2.36 & -1.68 \\ -32.54 & -2.78 & 0.68 \\ -14.18 & 4.75 & 0.30 \\ -19.91 & -4.39 & 0.97 \\ 8.50 & -1.44 & -1.36 \\ -7.82 & 1.89 & 0.83 \\ 47.87 & -7.86 & 0.25 \end{pmatrix}$$

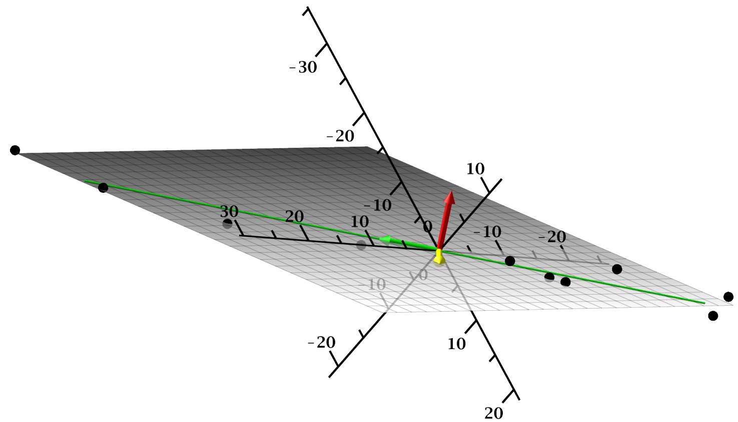
(hvis rækker er koordinater for $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \ldots$ mht. basen $\mathcal{B} = \{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3\}$)

gælder:

- Tallene i første søjle er "store".
- Tallene i anden søjle er "knap så store".
- Tallene i tredje søjle er "små/ubetydelige".

Konklusion på PCA. Datapunkterne i $\mathbf{Y}$ (og $\mathbf{X}$) har

- $\mathbf{p}_1$ som *first principal component*
  dvs. datapunkterne peger "meget" i $\mathbf{p}_1$-retningen.
- $\mathbf{p}_2$ som *second principal component*
  dvs. datapunkterne peger "knap så meget" i $\mathbf{p}_2$-retningen.
- $\mathbf{p}_3$ som *third principal component*
  dvs. datapunkterne peger "kun lidt" i $\mathbf{p}_3$-retningen.



Dimension reduction. Det originale datasæt $\mathbf{X}$ kan skrives som

$$\mathbf{X} = \mathbf{Y} + \mathbf{M} = \mathbf{YI} + \mathbf{M} = (\mathbf{YP})\mathbf{P}^\mathsf{T} + \mathbf{M} = \mathbf{CP}^\mathsf{T} + \mathbf{M}$$

dvs.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 39.9 & 75.1 & 36.4 \\ 60.1 & 37.8 & 63.5 \\ 47.0 & 67.6 & 47.0 \\ 64.1 & 20.1 & 71.1 \\ 66.4 & 19.0 & 70.2 \\ 61.7 & 37.7 & 65.5 \\ 61.0 & 27.4 & 62.3 \\ 48.9 & 50.5 & 50.4 \\ 58.5 & 40.6 & 60.0 \\ 32.1 & 75.8 & 24.5 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0.13 \\ -12.41 & 2.91 & 0.08 \\ 23.86 & 6.94 & -0.20 \\ -31.28 & -2.36 & -1.68 \\ -32.54 & -2.78 & 0.68 \\ -14.18 & 4.75 & 0.30 \\ -19.91 & -4.39 & 0.97 \\ 8.50 & -1.44 & -1.36 \\ -7.82 & 1.89 & 0.83 \\ 47.87 & -7.86 & 0.25 \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}} \mathbf{P}^\mathsf{T} + \mathbf{M}$$

Egenskaber ved matricerne $\mathbf{P}^\mathsf{T}$ og $\mathbf{M}$:

- De er bygget op af *ubetydeligt få* tal (hhv. 9 og 3 tal).
- De "oversætter" mellem $\mathbf{X}$ og $\mathbf{C}$.

Matricerne

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 39.9 & 75.1 & 36.4 \\ 60.1 & 37.8 & 63.5 \\ 47.0 & 67.6 & 47.0 \\ 64.1 & 20.1 & 71.1 \\ 66.4 & 19.0 & 70.2 \\ 61.7 & 37.7 & 65.5 \\ 61.0 & 27.4 & 62.3 \\ 48.9 & 50.5 & 50.4 \\ 58.5 & 40.6 & 60.0 \\ 32.1 & 75.8 & 24.5 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0.13 \\ -12.41 & 2.91 & 0.08 \\ 23.86 & 6.94 & -0.20 \\ -31.28 & -2.36 & -1.68 \\ -32.54 & -2.78 & 0.68 \\ -14.18 & 4.75 & 0.30 \\ -19.91 & -4.39 & 0.97 \\ 8.50 & -1.44 & -1.36 \\ -7.82 & 1.89 & 0.83 \\ 47.87 & -7.86 & 0.25 \end{pmatrix}$$

består begge to af *mange* tal ($3n = 3 \cdot 10 = 30$ tal), og de kræver derfor meget lagerplads at gemme på en hard disk.

Da sidste søjle i $\mathbf{C}$ er $\simeq 0$, så begås kun en *lille fejl* ved at erstatte $\mathbf{C}$ med

$$\mathbf{C}' = \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0 \\ -12.41 & 2.91 & 0 \\ 23.86 & 6.94 & 0 \\ -31.28 & -2.36 & 0 \\ -32.54 & -2.78 & 0 \\ -14.18 & 4.75 & 0 \\ -19.91 & -4.39 & 0 \\ 8.50 & -1.44 & 0 \\ -7.82 & 1.89 & 0 \\ 47.87 & -7.86 & 0 \end{pmatrix}.$$

Det ville dog være en *grov fejl* at se bort fra sidste søjle i det originale datasæt $\mathbf{X}$. Vi har altså bortkastet data på en intelligent måde!

Matricen

$$\mathbf{C}' = \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0 \\ -12.41 & 2.91 & 0 \\ 23.86 & 6.94 & 0 \\ -31.28 & -2.36 & 0 \\ -32.54 & -2.78 & 0 \\ -14.18 & 4.75 & 0 \\ -19.91 & -4.39 & 0 \\ 8.50 & -1.44 & 0 \\ -7.82 & 1.89 & 0 \\ 47.87 & -7.86 & 0 \end{pmatrix}$$

kræver kun $2n = 2 \cdot 10 = 20$ tal at gemme på en hard disk. Og fra $\mathbf{C}'$ kan man rekonstruere det originale datasæt med stor nøjagtighed:

$$\mathbf{X}' := \mathbf{C}'\mathbf{P}^{\mathsf{T}} + \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 37.92 & 2.35 & 0 \\ -12.41 & 2.91 & 0 \\ 23.86 & 6.94 & 0 \\ -31.28 & -2.36 & 0 \\ -32.54 & -2.78 & 0 \\ -14.18 & 4.75 & 0 \\ -19.91 & -4.39 & 0 \\ 8.50 & -1.44 & 0 \\ -7.82 & 1.89 & 0 \\ 47.87 & -7.86 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{P}^{\mathsf{T}} + \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 39.9 & 75.1 & 36.5 \\ 60.0 & 37.8 & 63.5 \\ 47.2 & 67.6 & 46.9 \\ 65.5 & 20.2 & 70.2 \\ 65.8 & 19.0 & 70.6 \\ 61.4 & 37.7 & 65.7 \\ 60.2 & 27.4 & 62.8 \\ 50.0 & 50.6 & 49.6 \\ 57.8 & 40.6 & 60.5 \\ 31.9 & 75.8 & 24.6 \end{pmatrix}.$$

Bemærk, at

$$\mathbf{X}' = \begin{pmatrix} 39.9 & 75.1 & 36.5 \\ 60.0 & 37.8 & 63.5 \\ 47.2 & 67.6 & 46.9 \\ 65.5 & 20.2 & 70.2 \\ 65.8 & 19.0 & 70.6 \\ 61.4 & 37.7 & 65.7 \\ 60.2 & 27.4 & 62.8 \\ 50.0 & 50.6 & 49.6 \\ 57.8 & 40.6 & 60.5 \\ 31.9 & 75.8 & 24.6 \end{pmatrix} \quad \text{er tæt på} \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 39.9 & 75.1 & 36.4 \\ 60.1 & 37.8 & 63.5 \\ 47.0 & 67.6 & 47.0 \\ 64.1 & 20.1 & 71.1 \\ 66.4 & 19.0 & 70.2 \\ 61.7 & 37.7 & 65.5 \\ 61.0 & 27.4 & 62.3 \\ 48.9 & 50.5 & 50.4 \\ 58.5 & 40.6 & 60.0 \\ 32.1 & 75.8 & 24.5 \end{pmatrix}$$

fordi differencen er lille relativt til $\mathbf{X}$:

$$\mathbf{X} - \mathbf{X}' = \begin{pmatrix} 0.11 & 0.01 & -0.07 \\ 0.07 & 0.00 & -0.05 \\ -0.17 & -0.01 & 0.11 \\ -1.40 & -0.08 & 0.93 \\ 0.56 & 0.03 & -0.37 \\ 0.25 & 0.02 & -0.17 \\ 0.81 & 0.05 & -0.54 \\ -1.13 & -0.07 & 0.75 \\ 0.69 & 0.04 & -0.46 \\ 0.21 & 0.01 & -0.14 \end{pmatrix}.$$

Konklusion.

- Vi har reduceret et $3n = 30$ dimensionalt datasæt til et $2n = 20$ dimensionalt datasæt uden at begå særligt store fejl.
- Med en lidt større fejl kunne vi have reduceret det til et $1n = 10$ dimensionalt datasæt (ved også at sætte anden søjle i $\mathbf{C}$ til nul).

Denne anvendelse af PCA kaldes dimension reduction.

Fordele ved dimension reduction.

- Man sparer lagerplads på hard disken.
- Manipulation/beregninger med datasættet kan udføres hurtigere.