אנליזה נומרית (234107)
תרגול 5 - ערכים עצמיים וסינגולריים

נושאים שייסקרו:
1. ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים - הדגמת היסודות
2. ערכים עצמיים של מטריצה משולשת
3. ערכים סינגולריים ופירוק ה- SVD
4. קירוב מטריצות עם אילוץ דרגה והקשר ל- PCA
5. ייצוג וזיהוי ספרות יעיל בעזרת PCA
6. Fisher Linear Discriminant Analysis (FLDA)

1. ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים - הדגמת היסודות

בהרצאה ראינו שעבור מטריצה ריבועית $\mathbf{A}$, אם מתקיים

$$\mathbf{A}\underline{v} = \lambda \underline{v}$$

אז הסקלר λ והוקטור $\underline{v} \neq 0$ הם ערך עצמי ווקטור עצמי של $\mathbf{A}$. נציג כאן דוגמה נוספת לחישוב ערכים ווקטורים עצמיים של מטריצה. נתונה המטריצה הבאה:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 3 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

לשם חישוב הע"ע נדרוש $\det\{\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}\} = 0$. נפתח את המשוואה האופיינית של המטריצה ונקבל:

$$\det\{\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}\} = \det\begin{bmatrix} 1-\lambda & 2 & 4 \\ 2 & 3-\lambda & 2 \\ 4 & 2 & 1-\lambda \end{bmatrix} =$$
$$= (1-\lambda)\cdot\left[(3-\lambda)(1-\lambda)-4\right] - 2\left[2(1-\lambda)-8\right] + 4\left[4-4(3-\lambda)\right] =$$
$$= (1-\lambda)\cdot\left[\lambda^2 - 4\lambda - 1\right] - 2\left[-2\lambda - 6\right] + 4\left[4\lambda - 8\right] =$$
$$= -\lambda^3 + 5\lambda^2 + 17\lambda - 21$$

כעת עלינו למצוא את האפסים של הפולינום $-\lambda^3 + 5\lambda^2 + 17\lambda - 21$. עם זאת, ננקוט בגישה שונה: נחזור למטריצה $\mathbf{A}$ ונשים לב כי סכומי כל השורות בה שווים (ל-7). מכאן נוכל להסיק ש

$$\underline{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

הינו וקטור עצמי שלה עם ע"ע $\lambda_1 = 7$, שהוא למעשה סכום כל שורה. זאת כיוון שמתקיים:

$$\mathbf{A}\underline{v}_1=\begin{bmatrix}1&2&4\\2&3&2\\4&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7\\7\\7\end{bmatrix}=7\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}=7\underline{v}_1$$

בהינתן ש- $\lambda_1=7$ הינו ע"ע אז הוא גם אפס של המשוואה האופיינית, ולכן נוכל לחשב את שני הערכים העצמיים הנותרים בעזרת חלוקת הפולינום $-\lambda^3+5\lambda^2+17\lambda-21$ ב- $\lambda-7$ וקבלת הפולינום

$$-\lambda^2-2\lambda+3=0$$

זהו פולינום מסדר שני שעבורו ישנה נוסחה פשוטה למציאת האפסים. מחישוב פשוט נקבל $\lambda_3=-3,\lambda_2=1$. עבור הע"ע $\lambda_2=1$ נחשב את הוקטור העצמי לפי המשוואה

$$.\left(\mathbf{A}-\lambda_2\mathbf{I}\right)\underline{v}=\begin{bmatrix}1-\lambda_2&2&4\\2&3-\lambda_2&2\\4&2&1-\lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&2&4\\2&2&2\\4&2&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

נחליף את השורה הראשונה בשנייה ונקבל ע"י אלימינציה גאוסית:

$$\begin{bmatrix}2&2&2\\0&2&4\\4&2&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix}2&2&2\\0&2&4\\0&-2&-4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix}2&2&2\\0&2&4\\0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

לכן הפתרון יהיה

$$\underline{v}_2=\begin{bmatrix}-1\\2\\-1\end{bmatrix}$$

או כל מכפלה שלו בסקלר. באותו אופן נקבל עבור $\lambda_3=-3$ את המשוואה

$$\left(\mathbf{A}-\lambda_3\mathbf{I}\right)\underline{v}=\begin{bmatrix}1-\lambda_3&2&4\\2&3-\lambda_3&2\\4&2&1-\lambda_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4&2&4\\2&6&2\\4&2&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

וע"י אלימינציה גאוסית נקבל

$$\begin{bmatrix}4&2&4\\0&5&0\\0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow\underline{v}_3=\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}$$

נשים לב שלכל הערכים העצמיים מתאים תת מרחב חד-מימדי של פתרונות לוקטור העצמי המתאים להם. כמו כן, קבוצת הוקטורים העצמיים שקיבלנו היא קבוצה אורתוגונלית

$$\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1\\2\\-1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}.$$

התוצאות שקיבלנו תואמות את המשפטים הבאים שנלמדו בהרצאה:

משפט: אם $\mathbf{A}$ מטריצה סימטרית וממשית בגודל n-על-n, אז:

- כל ערכיה ווקטוריה העצמיים ממשיים.
- וקטורים עצמיים המתייחסים לערכים עצמיים שונים יהיו אורתוגונליים.
- המטריצה לכסינה. כלומר, גם אם ערך עצמי מופיע בריבוי, ריבויו הגיאומטרי יהיה זהה.

משפט: אם $\mathbf{A}$ מטריצה סימטרית וממשית בגודל n-על-n, אז היא ניתנת ללכסון אורתוגונלי מהצורה

$$\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{AQ}=\mathbf{D},$$

כאשר $\mathbf{Q}$ מטריצה אורתונורמלית אשר עמודותיה הן הוקטורים העצמיים, ו-$\mathbf{D}$ מטריצה אלכסונית עם הערכים העצמיים באלכסונה.

את המטריצה $\mathbf{Q}$ עבור המטריצה מהדוגמה לעיל נקבל ע"י נרמול הו"ע והצבתם כעמודותיה:

$$\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

מכיוון שלא כל הע"ע של המטריצה $\mathbf{A}$ הם חיוביים, ניתן לדעת שהיא אינה חיובית מוגדרת לפי המשפט הבא מההרצאה:

משפט: אם $\mathbf{A}$ מטריצה סימטרית, ממשית וחיובית מוגדרת, בגודל n-על-n, אז כל ערכיה העצמיים ממשיים וחיוביים. אם מטריצה זו חיובית חצי מוגדרת, ערכיה העצמיים ממשיים ואי-שליליים.

2. ערכים עצמיים ווקטורים עצמיים של מטריצה משולשת

קל לראות שהע"ע של מטריצה משולשת, עליונה או תחתונה, הם איברי האלכסון הראשי שלה. נבדוק כעת מה הם הו"ע המתאימים לאותם ערכים עצמיים. ניקח כדוגמה את המטריצה הבאה:

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1&2&3&4&5\\0&6&7&8&9\\0&0&10&11&12\\0&0&0&13&14\\0&0&0&0&15\end{bmatrix}$$

כאמור הע"ע של המטריצה הם $\lambda_1=1,\lambda_2=6,\lambda_3=10,\lambda_4=13,\lambda_5=15$. נחשב כעת את הו"ע המתאים לכל ע"ע. עבור הע"ע הראשון $\lambda_1=1$ נקבל:

$$\begin{bmatrix}0&2&3&4&5\\0&5&7&8&9\\0&0&9&11&12\\0&0&0&12&14\\0&0&0&0&14\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\\v_4\\v_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow \underline{v}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$

עבור הע"ע השני $\lambda_2=6$ נקבל

$$\begin{bmatrix}-5&2&3&4&5\\0&0&7&8&9\\0&0&4&11&12\\0&0&0&7&14\\0&0&0&0&9\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\\v_4\\v_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow \underline{v}_2=\begin{bmatrix}2\\5\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$

עבור הע"ע השלישי $\lambda_3=10$ נקבל

$$\begin{bmatrix}-9&2&3&4&5\\0&-4&7&8&9\\0&0&0&11&12\\0&0&0&3&14\\0&0&0&0&5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\\v_4\\v_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow \underline{v}_3=\begin{bmatrix}26/9\\7\\4\\0\\0\end{bmatrix}$$

עבור הע"ע הרביעי $\lambda_4=13$ נקבל

$$\begin{bmatrix}-12&2&3&4&5\\0&-7&7&8&9\\0&0&-3&11&12\\0&0&0&0&14\\0&0&0&0&2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v_1\\v_2\\v_3\\v_4\\v_5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}\Rightarrow \underline{v}_4=\begin{bmatrix}517/12\\101\\77\\21\\0\end{bmatrix}$$

עבור הע"ע החמישי $\lambda_5 = 15$ נקבל

$$\begin{bmatrix} -14 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 0 & -9 & 7 & 8 & 9 \\ 0 & 0 & -5 & 11 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 14 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \underline{v}_5 = \begin{bmatrix} 45.904 \\ 105\frac{1}{3} \\ 89 \\ 35 \\ 5 \end{bmatrix}$$

נשים לב שהתקבלה תופעה מעניינת ובה המטריצה של הו"ע גם היא מטריצה משולשת עליונה. נשאל את עצמנו האם הדבר נכון תמיד?

במקרה הכללי, מערכת המשוואות למציאת הו"ע עבור הע"ע λ_i תהיה מהצורה

$$\begin{bmatrix} \lambda_1-\lambda_i & * & * & * & * & * & * \\ 0 & \ddots & * & * & * & * & * \\ 0 & \ddots & \lambda_{i-1}-\lambda_i & * & * & * & * \\ \vdots & \ddots & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & \lambda_{i+1}-\lambda_i & * & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & * \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 & \lambda_n-\lambda_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_{i-1} \\ v_i \\ v_{i+1} \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

בגלל המבנה המיוחד של מערכת המשוואות, מהחלק התחתון שלה נקבל מערכת משוואות ובה n-i+1 משוואות ב- n-i נעלמים:

$$\begin{bmatrix} * & * & * \\ \lambda_{i+1}-\lambda_i & * & * \\ 0 & \ddots & * \\ 0 & 0 & \lambda_n-\lambda_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{i+1} \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

נניח בלי הגבלת הכלליות שאין $j > i$ כך ש- $\lambda_i = \lambda_j$ (אחרת נבחר את i להיות אותו j ואז כל המופעים האחרים של אותו הע"ע יופיעו בחלק העליון של מערכת המשוואות הגדולה) ולכן נקבל שמתקיים $v_{i+1} = ... = v_n = 0$. כלומר, הו"ע עבור הע"ע ה-i הוא מהצורה $\begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_i & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^T$.

נשארנו עם מערכת המשוואות הבאה ובה i-1 משוואות ב- i נעלמים :

$$\begin{bmatrix} \lambda_1-\lambda_i & * & * & * \\ 0 & \ddots & * & * \\ 0 & 0 & \lambda_{i-1}-\lambda_i & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

נשים לב שאם הע"ע שונים זה מזה, למערכת משוואות זו יש דרגת חופש אחת ולכן נקבל ממנה ו"ע יחיד.
אם למטריצה קיימים כמה ע"ע זהים, היא תהיה לכסינה רק אם הריבוי הגיאומטרי של כל ע"ע שווה לריבוי האלגברי שלו, כלומר- אם עבור ע"ע המופיע בריבוי, למערכת המשוואות האחרונה יש יותר מדרגת חופש אחת ולכן היא מולידה מספר ו"ע כתלות בריבוי האלגברי.
נדגים את הנקודה האחרונה בדוגמה לעיל. אם נשנה את איבר האלכסון השלישי להיות 1 אז מערכת המשוואות למציאת הוקטור העצמי השייך לע"ע $\lambda=1$ תהיה:

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 0 & 5 & 7 & 8 & 9 \\ 0 & 0 & 0 & 11 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 12 & 14 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \underline{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

במקרה זה קיבלנו רק ו"ע אחד שמתאים לע"ע 1 (כלומר ריבוי גיאומטרי 1 וריבוי אלגברי 2), ועל כן המטריצה לא לכסינה.

3. ערכים סינגולריים ופירוק ה- SVD

משפט: כל מטריצה ממשית $\mathbf{A}$ בגודל m שורות על n עמודות ניתנת לפירוק (Singular Value Decomposition - SVD) מהצורה $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^T$ כאשר:

- $\mathbf{U}$ מטריצה אורתונורמלית בגודל m-על-m
- $\mathbf{V}$ מטריצה אורתונורמלית בגודל n-על-n
- $\mathbf{\Sigma}$ מטריצה "אלכסונית" בגודל m שורות על n עמודות, בה איברי האלכסון ממשיים ואי-שליליים, מסודרים באופן יורד, ולכל היותר $\min(m,n)$ מהם שונים מאפס.

עד עתה ראינו כיצד ניתן לחשב את הע"ע של מטריצה. נראה כעת כיצד ניתן להשתמש בטכניקת חישוב ע"ע עבור חישוב פירוק SVD של מטריצה.
לשם כך נניח בלי הגבלת הכלליות ש- $m \le n$.
נדון בשתי שיטות לחישוב פירוק ה-SVD.

בשיטה הראשונה ניעזר בעובדה ש- $\mathbf{AA}^T = \left(\mathbf{U\Sigma V}^T\right)\left(\mathbf{U\Sigma V}^T\right)^T = \mathbf{U}\left(\mathbf{\Sigma\Sigma}^T\right)\mathbf{U}^T$.

מכאן שנוכל לחשב את $\mathbf{U}$ ו- $\mathbf{\Sigma}$ ע"י חישוב הע"ע והו"ע של $\mathbf{AA}^T$: הו"ע יבנו את עמודותיה של המטריצה $\mathbf{U}$, ואילו שורשי הע"ע יגדירו את הערכים הסינגולריים, שהם איברי האלכסון של $\mathbf{\Sigma}$.

לאחר שנחשב את $\mathbf{U}$ ו-$\mathbf{\Sigma}$, ניעזר בעובדה ש-$\mathbf{U}^T\mathbf{A} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$. ע"י פעולת שחלוף נקבל $\mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T = \mathbf{A}^T\mathbf{U}$. מכאן שנוכל לחשב את העמודות ב-$\mathbf{V}$ שמתאימות ל $\sigma_i \neq 0$ ע"י הקשר $\underline{v}_i = \mathbf{A}^T\underline{u}_i / \sigma_i$. את שאר העמודות ב-$\mathbf{V}$ (שימו לב – הנחנו כי $m \leq n$ ולכן כמות העמודות ב-$\mathbf{V}$ גדולה מכמות העמודות ב-$\mathbf{U}$) נחשב ע"י מציאת בסיס אורתונורמלי שמשלים את העמודות הראשונות.

השיטה השנייה מחשבת את פירוק ה-SVD ע"י חישוב הע"ע של המטריצה הבאה:

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^T & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+n)\times(m+n)}.$$

הוקטורים הסינגולריים והערכים הסינגולריים של $\mathbf{A}$ מתקבלים ע"י הקשר שמוצג במשפט הבא.

משפט: m הזוגות הראשונים של הע"ע והו"ע של

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^T & 0 \end{bmatrix}$$

הם $\begin{bmatrix} \underline{u}_i \\ \underline{v}_i \end{bmatrix}$ עם ע"ע σ_i ו-$\begin{bmatrix} \underline{u}_i \\ -\underline{v}_i \end{bmatrix}$ עם ע"ע $-\sigma_i$.

הערה: למטריצה הנ"ל ישנם $m+n$ ע"ע וו"ע. תחת ההנחה כי $m \leq n$, מתקיים $m+n \geq 2m$, כלומר בהכרח קיימים m זוגות כאלה.

הוכחה: פשוט נציב את הפתרונות המוצעים ונראה כי אכן הם מקיימים את הקשרים הנחוצים:

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^T & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \underline{u}_i \\ \underline{v}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}\underline{v}_i \\ \mathbf{A}^T\underline{u}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_i\underline{u}_i \\ \sigma_i\underline{v}_i \end{bmatrix} = \sigma_i\begin{bmatrix} \underline{u}_i \\ \underline{v}_i \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^T & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \underline{u}_i \\ -\underline{v}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{A}\underline{v}_i \\ \mathbf{A}^T\underline{u}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sigma_i\underline{u}_i \\ \sigma_i\underline{v}_i \end{bmatrix} = -\sigma_i\begin{bmatrix} \underline{u}_i \\ -\underline{v}_i \end{bmatrix}$$

כדי לחשב את פירוק ה-SVD המבוקש של $\mathbf{A}$ בעזרת המשפט הנ"ל, כל שעלינו לעשות הוא למצוא את m הזוגות הראשונים של ע"ע וו"ע של המטריצה $\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^T & 0 \end{bmatrix}$.

הע"ע (החיוביים) יהיו הערכים הסינגולריים המבוקשים σ_i, ואת הו"ע המתאימים נפריד לשני מרכיביהם למציאת $\underline{u}_i$ ו-$\underline{v}_i$.

דוגמה:

חשב את פירוק ה-SVD של המטריצה $\mathbf{A}=\begin{bmatrix}-1 & 3 & 1\\ 1 & -1 & 3\end{bmatrix}$.

פתרון:

נדגים את ביצוע הפירוק המבוקש בשתי השיטות.

בשיטה הראשונה, נבצע פירוק ספקטרלי למטריצה

$$\mathbf{AA}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}-1 & 3 & 1\\ 1 & -1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 3 & -1\\ 1 & 3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}11 & -1\\ -1 & 11\end{bmatrix}.$$

קל למצוא כי הע"ע שלה הינם $\lambda_1=12$ עם הו"ע $\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$ ו- $\lambda_2=10$ עם הו"ע $\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ (בדקו זאת). כאמור, הו"ע הנ"ל יבנו את עמודותיה של המטריצה $\mathbf{U}$, ואילו שורשי הע"ע יגדירו את הערכים הסינגולריים, שהם איברי האלכסון של $\mathbf{\Sigma}$.

לאחר נרמול הו"ע (זכרו ש-$\mathbf{U}$ היא מטריצה אורתונורמלית) והוצאת שורש לע"ע, נקבל

$$\mathbf{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sqrt{12} & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{10} & 0\end{bmatrix}\ ,\quad \mathbf{U}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}.$$

למציאת $\mathbf{V}$, ניעזר בקשר $\underline{v}_i=\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\underline{u}_i/\sigma_i$:

$$\underline{v}_1=\frac{\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\underline{u}_1}{\sigma_1}=\frac{1}{\sqrt{12}}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 3 & -1\\ 1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1/\sqrt{6}\\ 2/\sqrt{6}\\ -1/\sqrt{6}\end{bmatrix}\ ;\quad \underline{v}_2=\frac{\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\underline{u}_2}{\sigma_2}=\frac{1}{\sqrt{10}}\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 3 & -1\\ 1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 1/\sqrt{5}\\ 2/\sqrt{5}\end{bmatrix}$$

להשלמת $\mathbf{V}$ למטריצה אורתונורמלית יש לנו צורך בוקטור נוסף. לשם כך נגריל וקטור אקראי, נפעיל עליו את תהליך גראם-שמידט, ונקבל $\underline{v}_3=\begin{bmatrix}5/\sqrt{30}\\ 2/\sqrt{30}\\ -1/\sqrt{30}\end{bmatrix}$.

בסה"כ, מצאנו שפירוק ה-SVD נתון ע"י:

$$\mathbf{A}=\mathbf{U\Sigma V}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{12} & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{10} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-1/\sqrt{6} & 2/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6}\\ 0 & 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5}\\ 5/\sqrt{30} & 2/\sqrt{30} & -1/\sqrt{30}\end{bmatrix}$$

על מנת לבצע את הפירוק בשיטה השנייה, עלינו לחשב ע"ע וו"ע למטריצה

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^T & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

במקרה זה, הע"ע שיתקבלו הם $\lambda_1 = \sqrt{12}, \lambda_2 = \sqrt{10}, \lambda_3 = 0, \lambda_4 = -\sqrt{10}, \lambda_5 = -\sqrt{12}$.

בעזרת המשפט לעיל, הערכים הסינגולריים המבוקשים יהיו m=2 הע"ע החיוביים.

נמצא את הו"ע המתאימים להם:

עבור הע"ע $\sigma_1 = \lambda_1 = \sqrt{12}$ יתקבל הו"ע $\begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} & 1/2\sqrt{3} \end{bmatrix}^T$, ועבור

הע"ע $\sigma_2 = \lambda_2 = \sqrt{10}$ יתקבל הו"ע $\begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 1/\sqrt{10} & 2/\sqrt{10} \end{bmatrix}^T$.

אם נפריד את הוקטורים הללו לרכיביהם וננרמלם, נקבל:

$$\underline{u}_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}, \underline{v}_1 = \begin{bmatrix} -1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \end{bmatrix}, \underline{u}_2 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}, \underline{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix}.$$

כמובן שנידרש להשלמת המטריצה **V** למטריצה אורתונורמלית ע"י מציאת וקטור נוסף $\underline{v}_3$, בדיוק כמו בשיטה הראשונה.

בסיכומו של דבר, ביצוע הפירוק בשיטה זו מוליד את אותו פירוק SVD שהתקבל בשיטה הקודמת.

בהינתן שתי השיטות הנ"ל, נשאלת השאלה איזו שיטה עדיפה?

התשובה תלויה במימדים m, n, ובגודל של הערכים הסינגולריים σ_i (או יותר נכון, ביחס בין הקטן ביותר והגדול ביותר). היתרון של השיטה הראשונה מתבטא בעובדה שהיא מחשבת ע"ע של מטריצה בגודל $m \times m$. החיסרון שלה הוא שהיא מחשבת את הריבוע של הערכים הסינגולריים. כתוצאה מכך יכול להיווצר מצב שבו לא נוכל לחשב נכונה ערכים מסויימים. הדבר נובע מכך שייתכן שאת σ_i נוכל לייצג בעזרת דיוק המכונה שבה אנו עובדים אבל את σ_i^2 לא נוכל. לדוגמה אם σ_i הוא מסדר גודל של 10^{-4} ודיוק המכונה שלנו הוא 10^{-6} אז לא נוכל לחשב את σ_i^2 מפני שהוא יהיה מסדר גודל 10^{-8} (שהוא קטן מדיוק המכונה שלנו).

חסרון נוסף של השיטה הראשונה הוא של- $\mathbf{AA}^{T}$ יש condition number $\left(\sigma_{max}/\sigma_{min}\right)^{2}$ שהוא גדול יותר (בריבוע) מזה של המטריצה בשיטה השנייה שהוא $\sigma_{max}/\sigma_{min}$.
לכן נסכם ונאמר שאם m משמעותית קטן מ-n והערכים הסינגולריים הקטנים פחות חשובים לנו, אז השיטה הראשונה עדיפה. בכל מקרה אחר השיטה השנייה עדיפה.

4. קירוב מטריצות עם אילוץ דרגה והקשר ל-PCA

בהרצאה ראינו את המשפט הבא:

משפט: עבור מטריצה $\mathbf{A}$ בעלת פירוק SVD מהצורה

$$\mathbf{A}=\mathbf{U\Sigma V}^{T}=\sum_{k=1}^{n}\sigma_{k}\underline{u}_{k}\underline{v}_{k}^{T}$$

עם ערכים סינגולריים בסדר יורד, פתרון הבעיה

$$\underset{\mathbf{A}_{K_0}}{\arg\min}\left\|\mathbf{A}-\mathbf{A}_{K_0}\right\|_{F}^{2}\ \text{ subject to rank}\left\{\mathbf{A}_{k}\right\}=K_{0}$$

הינו

$$\mathbf{A}_{K_0}=\mathbf{U}\Sigma_{K_0}\mathbf{V}^{T}=\sum_{k=1}^{K_0}\sigma_{k}\underline{u}_{k}\underline{v}_{k}^{T}$$

והמרחק בין המטריצות נתון ע"י

$$.\left\|\mathbf{A}-\mathbf{A}_{K_0}\right\|_{F}^{2}=\sum_{k=K_0+1}^{n}\sigma_{k}^{2}$$

כלומר, כל שעלינו לעשות הוא לזרוק את "זנב" סידרת הערכים הסינגולריים ולשמר את K_0 הדומיננטיים. נוכיח משפט זה, ונישען על טענת העזר הבאה:

טענת עזר: מתקיים כי $\left\|\mathbf{U}^{T}\mathbf{AV}\right\|_{F}^{2}=\left\|\mathbf{A}\right\|_{F}^{2}$ עבור כל זוג מטריצות יוניטריות (א"נ) $\mathbf{U},\mathbf{V}$.

הוכחה: קל לראות ש- $\left\|\mathbf{A}\right\|_{F}^{2}=\text{trace}\left(\mathbf{A}^{T}\mathbf{A}\right)=\sum_{i,j}a_{i,j}^{2}$ (פעולת ה- trace מסכמת את איברי האלכסון הראשי). מכאן

$$\left\|\mathbf{U}^{T}\mathbf{AV}\right\|_{F}^{2}=\text{trace}\left(\mathbf{V}^{T}\mathbf{A}^{T}\mathbf{UU}^{T}\mathbf{AV}\right)=\text{trace}\left(\mathbf{V}^{T}\mathbf{A}^{T}\mathbf{AV}\right)$$

כאשר בשוויון האחרון השתמשנו בעובדה ש- $\mathbf{UU}^{T}=\mathbf{I}$ מכיוון ש- $\mathbf{U}$ יוניטרית. על מנת להשלים את ההוכחה נשתמש בתכונה שלכל שתי מטריצות $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ ו- $\mathbf{B}\in\mathbb{R}^{n\times m}$ מתקיים $\text{trace}\left(\mathbf{AB}\right)=\text{trace}\left(\mathbf{BA}\right)$ (הוכח!). מכאן נקבל כי

$$\left\|\mathbf{U}^{T}\mathbf{AV}\right\|_{F}^{2}=\text{trace}\left(\mathbf{V}^{T}\mathbf{A}^{T}\mathbf{AV}\right)=\text{trace}\left(\mathbf{VV}^{T}\mathbf{A}^{T}\mathbf{A}\right)=\text{trace}\left(\mathbf{A}^{T}\mathbf{A}\right)=\left\|\mathbf{A}\right\|_{F}^{2}$$

כאשר השתמשנו בתכונה ש- $\mathbf{V}\mathbf{V}^{T}=\mathbf{I}$ בשל היותה של $\mathbf{V}$ יוניטרית. מש"ל.

בהינתן טענת העזר, הוכחת המשפט היא מאוד פשוטה. נניח כי $\hat{\mathbf{A}}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ היא הקירוב הטוב ביותר מדרגה K_0 עבור $\mathbf{A}=\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{T}$. לפי טענת העזר מתקיים

$$\left\|\mathbf{A}-\hat{\mathbf{A}}\right\|_F^2=\left\|\mathbf{U}^T\left(\mathbf{A}-\hat{\mathbf{A}}\right)\mathbf{V}\right\|_F^2=\left\|\mathbf{U}^T\mathbf{A}\mathbf{V}-\mathbf{U}^T\hat{\mathbf{A}}\mathbf{V}\right\|_F^2=\left\|\boldsymbol{\Sigma}-\mathbf{U}^T\hat{\mathbf{A}}\mathbf{V}\right\|_F^2$$

קל לראות שהקירוב הטוב ביותר עבור $\boldsymbol{\Sigma}$ מדרגה K_0 הוא המטריצה $\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}$ שמכילה את K_0 איברי האלכסון הראשונים ב- $\boldsymbol{\Sigma}$ ובשאר מכילה אפסים. לכן נקבל שמתקיים

$$\mathbf{U}^T\hat{\mathbf{A}}\mathbf{V}=\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}\Rightarrow\hat{\mathbf{A}}=\mathbf{U}\Sigma_{K_0}\mathbf{V}^T=\sum_{k=1}^{K_0}\sigma_k\,\underline{u}_k\,\underline{v}_k^T$$

ושהשגיאה היא

$$.\left\|\mathbf{A}-\hat{\mathbf{A}}\right\|_F^2=\left\|\boldsymbol{\Sigma}-\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}\right\|_F^2=\sum_{k=K_0+1}^{n}\sigma_k^2$$

אחד השימושים של קירוב זה הוא לייצוג נתונים בצורה "דחוסה".
נניח כי עמודות $\mathbf{A}$ מייצגות וקטורי נתונים כלשהם, ונניח כי ידוע לנו שהערכים הסינגולריים הקטנים של $\mathbf{A}$ הם זניחים, אז נוכל לדחוס אותה בעזרת העיקרון הבא:
נסמן ב- $\mathbf{V}_{K_0}$ ו- $\mathbf{U}_{K_0}$ את המטריצות שמורכבות מ- K_0 העמודות הראשונות של $\mathbf{V}$ ו- $\mathbf{U}$ בהתאמה. נשים לב ש- $\hat{\mathbf{A}}=\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}\mathbf{V}^T=\mathbf{U}_{K_0}\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}\mathbf{V}_{K_0}^T$, כאשר במעבר האחרון קטמנו מ- $\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}$ את שורות ועמודות האפסים וצמצמנו אותה למימד $K_0\times K_0$. מכאן נקבל שבמקום להחזיק את $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$ המקורית, נוכל להסתפק בשמירת המטריצות $\mathbf{U}_{K_0}^T\hat{\mathbf{A}}=\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}\mathbf{V}_{K_0}^T\in\mathbb{R}^{K_0\times n}$ ו- $\mathbf{U}_{K_0}$. לדוגמה, אם $\mathbf{A}$ בגודל $1{,}000$ שורות על $100{,}000$ עמודות ($m=1000, n=100000$), ואילו רק 20 ערכים סינגולריים הם דומיננטיים (כלומר, $K_0=20$), אזי במקום לשמור ולעבד מטריצה עם $mn=10^8$ כניסות, נידרש לשמירה ועיבוד של מטריצה בגודל $K_0n=2\cdot10^6$ (פי 50 קטנה יותר), ולצידה נאחסן את $\mathbf{U}_{K_0}$ שגודלה $mK_0=2\cdot10^4$ (אשר הינו זניח יחסית). אגב, את $\hat{\mathbf{A}}$ נקבל ע"י הכפלת $\mathbf{U}_{K_0}^T\hat{\mathbf{A}}$ ב- $\mathbf{U}_{K_0}$ משמאל:

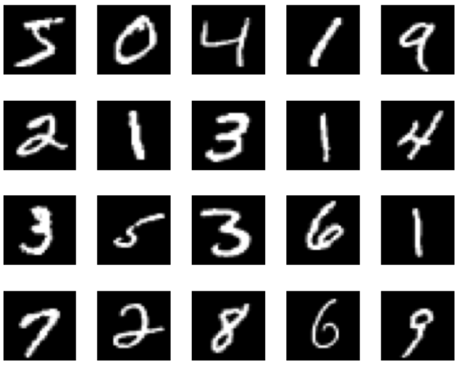
$$\mathbf{U}_{K_0}\mathbf{U}_{K_0}^T\hat{\mathbf{A}}=\mathbf{U}_{K_0}\boldsymbol{\Sigma}_{K_0}\mathbf{V}_{K_0}^T=\hat{\mathbf{A}}$$

מההצגה הזאת אפשר להסיק כי עמודות $\hat{\mathbf{A}}$ נפרשות ע"י עמודות $\mathbf{U}_{K_0}$. כלומר כל העמודות של $\hat{\mathbf{A}}$ נפרשות ע"י תת מרחב ממימד K_0 שנפרש ע"י וקטורי הבסיס שנמצאים

בעמודות $\mathbf{U}_{K_0}$. תהליך זה של מציאת מספר מצומצם של וקטורי בסיס עבור קבוצה של וקטורים נקרא Principal Component Analysis או בקיצור PCA. לקבוצת הוקטורים $\mathbf{U}_{K_0}$ נקרא בסיס ה-PCA. נדגים כעת שימוש לכלי זה.

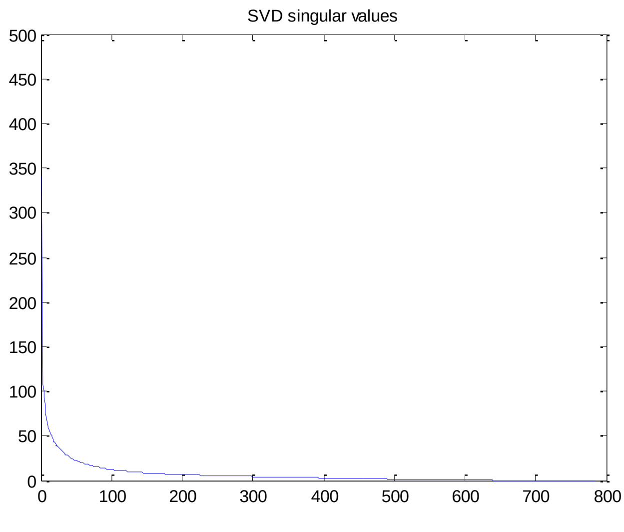
5. ייצוג וזיהוי יעיל של ספרות בעזרת PCA

אנו נראה כיצד ניתן להשתמש ב- PCA לשם הורדת מימד של מידע במימד גדול. את ההדגמה נבצע על מאגר של ספרות הנקרא MNIST. כל ספרה במאגר מיוצגת ע"י תמונה בגודל 28×28. להלן דוגמה של 20 הספרות הראשונות במאגר



כל ספרה נשמור בעזרת וקטור בגודל $784=28^2$ המכיל את עמודות התמונה של הספרה מסודרות אחת מתחת השנייה. את הוקטורים של הספרות נשים יחד במטריצה אחת $\mathbf{A}$ שבה כל עמודה $\underline{a}_i$ מייצגת ספרה מהמאגר. לכן, במטריצה זו 784 שורות ומספר עמודות כמספר הספרות שבהן נטפל.

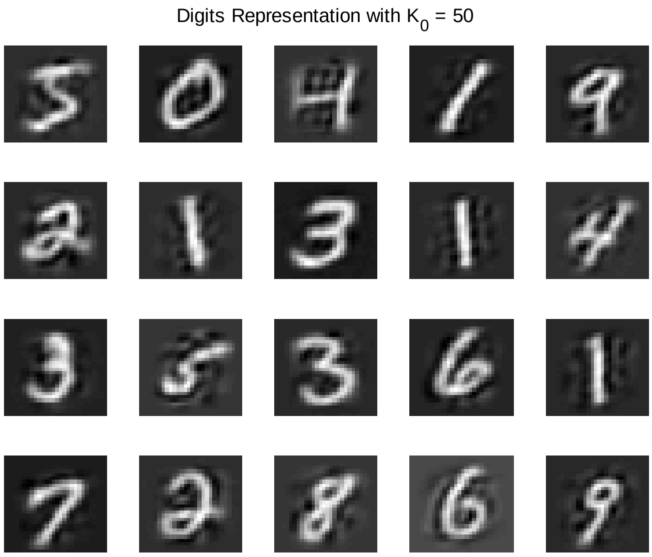
על מנת לבדוק האם מטריצת הספרות ניתנת לדחיסה, נבצע פירוק SVD של המטריצה המכילה את 3,000 הספרות הראשונות במאגר. גרף הערכים הסינגולריים המתקבל הוא



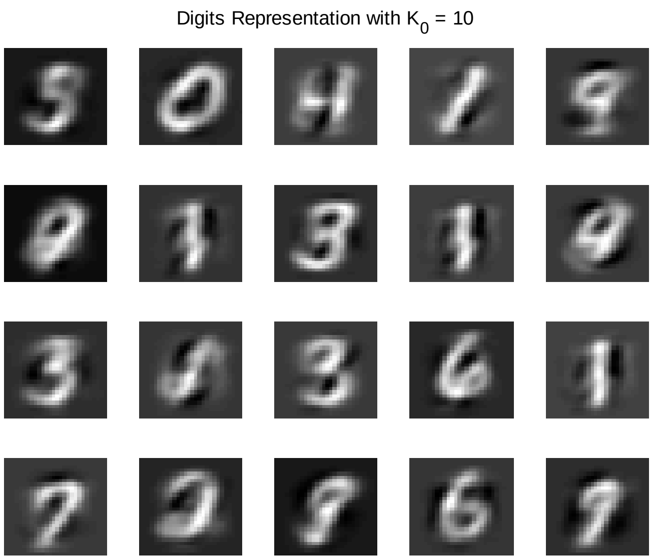
אפשר לשים לב ש-50 הערכים הסינגולריים הראשונים הם המשמעותיים ביותר לעומת שאר הערכים הזניחים לעומתם. לכן נבחר $K_0 = 50$ ונבנה את המטריצה

$$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_{K_0}\mathbf{U}_{K_0}^{T}\mathbf{A} .$$

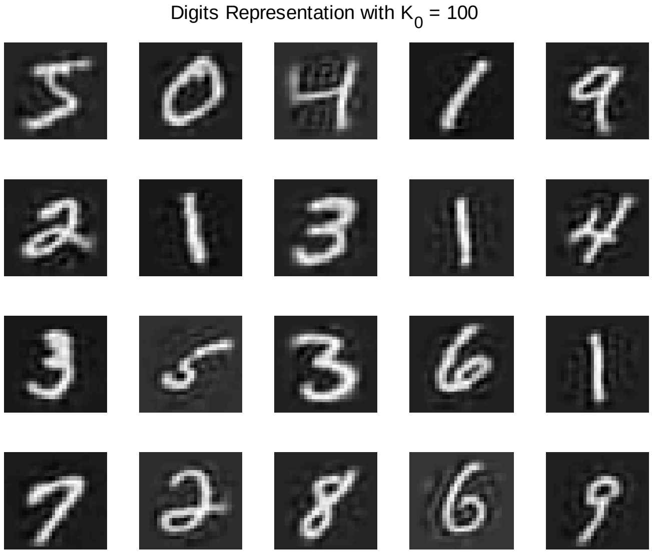
נבחן מה קרה לספרות שמיוצגות ע"י עמודות המטריצה. נציג כאן את 20 הספרות הראשונות:



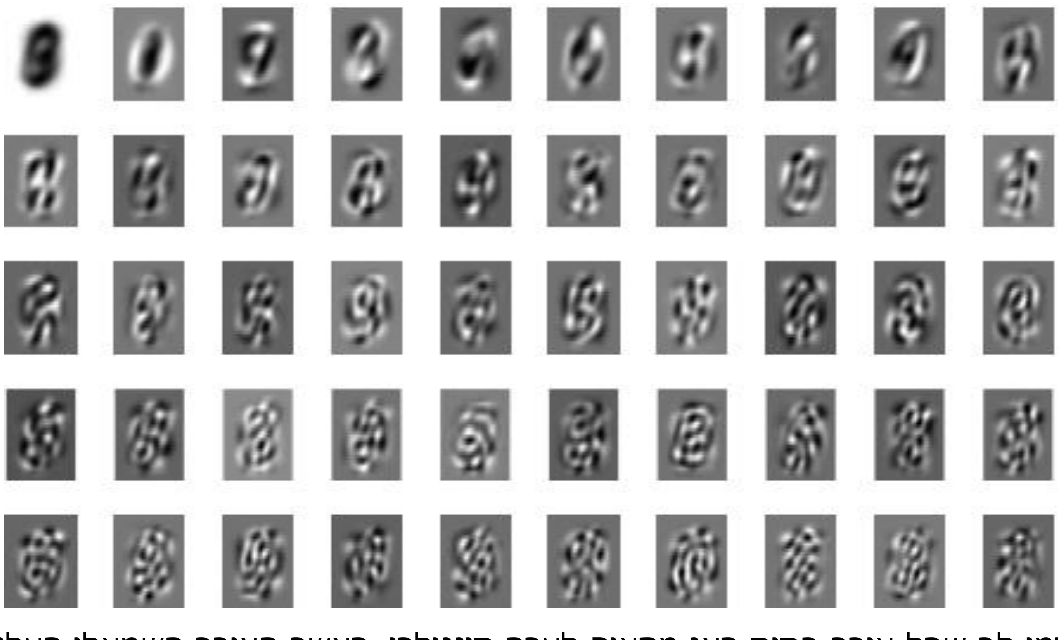
ניכר כי הן לא השתנו משמעותית. הסיבה היא, כמו שהסברנו קודם, שהערכים הסינגולריים המתאימים לאיברי הבסיס ב-$\mathbf{U}$ בהם לא השתמשנו הם זניחים. אם נבחר K_0 קטן יותר, למשל $K_0 = 10$, אז יתקבל ייצוג לא טוב לספרות בגלל שנאבד מידע משמעותי (הערכים הסינגולריים שנאפס גדולים יחסית):



ואם נבחר K_0 גדול יותר, כמו $K_0 = 100$, נתקרב מאוד לתמונות המקור, אך התוצאה לא תשתנה בהרבה כי כבר קיבלנו את רוב האינפורמציה עבור $K_0 = 50$ (הערכים הסינגולריים שהוספנו זניחים יחסית):



לפני שנמשיך, נציג את התמונות שמיוצגות ע"י עמודות $\mathbf{U}_{K_0}$ עבור $K_0 = 50$, כלומר את איברי הבסיס שפורשים את הספרות שמיוצגות ב- $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_{K_0}\mathbf{U}_{K_0}^{T}\mathbf{A}$.



שימו לב שכל איבר בסיס כאן מתאים לערך סינגולרי, כאשר האיבר השמאלי העליון מתאים לערך הסינגולרי הגדול ביותר σ_1 והאיבר הימני התחתון מתאים לערך הסינגולרי σ_{K_0} (הוקטורים מסודרים משמאל לימין ולאחר מכן מלמעלה למטה). לכן המידע המשמעותי ביותר נמצא בוקטורי הבסיס הראשונים ולאחר מכן החשיבות פוחתת ככל שאנו מתקדמים עם הוקטורים.

כסיכום ביניים: משמעות התהליך שעבר מ- $\mathbf{A}$ ל- $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{U}_{K_0}\mathbf{U}_{K_0}^T\mathbf{A}$ היא שניתן לייצג תמונה של ספרה בעזרת 50 במקום 784 מספרים, כאשר מספרים אלו מהווים את המקדמים של תמונות בסיס הפורשות את כל הספרות. כעת ננצל זאת לשם ייעול העבודה עם וקטורים אלו.

נדון בבעיה של זיהוי ספרות. נניח שנתונה לנו קבוצה של ספרות "אימון" שזהותן ידועה. כעת מגיעה קבוצת ספרות חדשה אותן עלינו לזהות. טכניקה ידועה לסיווג היא בעזרת אלגוריתם השכן הקרוב, Nearest Neighbor (NN). בהינתן ספרה חדשה אותה אנו רוצים לסווג, נחשב את מרחקה האוקלידי מכל הספרות בקבוצת האימון. הסיווג שתקבל הספרה יהיה זה המתייחס לספרה הקרובה אליה ביותר במאגר. במילים אחרות, עבור וקטור $\underline{b}$ שמייצג ספרה חדשה נרצה לפתור את הבעיה הבאה

$$\arg\min_i \|\underline{a}_i - \underline{b}\|_2^2$$

במאגר ספרות האימון שלנו ישנן 60,000 ספרות, ולכן נצטרך לבצע 60,000 חישובים של מרחק אוקלידי. אנו נרצה לפשט את החישוב.

טכניקה ראשונה שאינה משנה את הפתרון מניחה שהנורמה האוקלידית של ספרות האימון מחושבת וידועה מראש, ולכן

$$\begin{aligned}\arg\min_i \|\underline{a}_i - \underline{b}\|_2^2 &= \arg\min_i \|\underline{a}_i\|_2^2 - 2\underline{a}_i^T\underline{b} + \|\underline{b}\|_2^2 \\ &= \arg\min_i \|\underline{a}_i\|_2^2 - 2\underline{a}_i^T\underline{b} = \arg\max_i \; 2\underline{a}_i^T\underline{b} - \|\underline{a}_i\|_2^2\end{aligned}$$

כלומר נקבל שצריך למצוא את הספרה בעלת המכפלה הפנימית הגבוהה ביותר עם הספרה החדשה (ולהחסיר את $\|\underline{a}_i\|_2^2$ המהווה מספר ידוע) במקום את הספרה בעלת המרחק האוקלידי הקטן ביותר. שימו לב שפעולת חישוב זו יעילה יותר מאשר חישוב המרחק האוקלידי ישירות.

בהינתן 10,000 ספרות חדשות שאינן נמצאות במאגר האימון, מתקבל (התוצאות תלויות במחשב עליו מריצים) כי נוכל לזהות בעזרת טכניקה זאת 96.91% מהן תוך כ-18 שניות. על מנת להפחית את זמן החישוב, נוכל להוריד את מימד הוקטורים שאיתם אנו עובדים בעזרת הכפלה ב- $\mathbf{U}_{K_0}^T$. בהינתן ספרה שאותה נרצה לזהות, נכפיל גם אותה במטריצה $\mathbf{U}_{K_0}^T$ ואז נחשב NN. החישוב יתבצע כמו קודם בעזרת חישוב הנורמות מראש ומציאת מקסימום. במקרה הזה נקבל זיהוי של 97.22% מהספרות תוך 5.4 שניות בלבד.

נשים לב שלא רק שהורדנו את זמן החישוב אלא גם שיפרנו את הדיוק. הסיבה לשיפור בדיוק היא ש-PCA השאיר לנו רק את הרכיבים המשמעותיים של הספרות והוריד רכיבים פחות חשובים שעשויים להטעות ולהפריע בתהליך הזיהוי. ראוי לציין בהקשר זה ש-PCA משמש לעתים קרובות גם להורדת רעש מאותות.

6. Fisher Linear Discriminant Analysis (FLDA)

אנו עדיין עוסקים במשימות זיהוי, והפעם נרצה לבנות אלגוריתם אשר ידע להבדיל בין סוגי איריס שונים. אנו נתמקד בשני סוגי האיריס הבאים:

אירוס Setosa

אירוס Versicolor

כל פרח כזה יאופיין ע"י 4 מספרים המודדים אורכים של מרכיבים שונים בפרח (מידע נוסף על מקור מידע זה נמצא ב- http://en.wikipedia.org/wiki/Iris_flower_data_set).
נרצה לבנות מסווג ליניארי אשר ידע להפריד בין שני הסוגים, כלומר בהתקבל פרח חדש, נמדוד את ארבעת הגדלים הללו ונפעיל את האלגוריתם על המספרים המתקבלים על מנת לקבוע איזה סוג פרח זה. אפשר בהחלט לפעול כמו קודם, ובהגיע פרח חדש, לסווגו לפי השכן הקרוב. אנו ננקוט כאן בגישה אחרת לחלוטין ונפעיל שיטה הקרויה Fisher Linear Discriminant Analysis (FLDA).

לשם הבנת צורת פעולת ה-FLDA, נניח שבידינו יש שתי קבוצות של וקטורים: הקבוצה הראשונה $\{\underline{s}_i\}_{i=1}^{N_s}$ מתייחסת לקבוצת אירוס Setosa והשנייה $\{\underline{m}_i\}_{i=1}^{N_m}$ לאירוס Versicolor.
ניתן גם להניח ששתי הקבוצות באורך זהה $N_s = N_m = n$ (נניח n=50, כפי שבפועל יש במאגר זה). במקרה שלנו כל וקטור הוא ממימד 4 (מכיל 4 מאפיינים) ולכן קשה להתבונן בנתונים כמות שהם.

ההחלטה על פרח חדש שמגיע, $\underline{x}$, תיעשה ע"י הנוסחה $\mathrm{sign}\{\underline{w}^T\underline{x}-b\}$ - ערך חיובי לסוג אחד של איריס וערך שלילי לאחר. הביטוי $\underline{w}^T\underline{x}$ מבצע ממוצע משוקלל של רביעיית הערכים לשם קבלת החלטה. הפעולה הזו הינה הטלה של הוקטור הנכנס לציר החד-מימדי, ואז ערכים סקלריים מתחת ל-b משויכים לקבוצה אחת וערכים מעליו - לאחרת.

עלינו "ללמד" את המסווג, כלומר למצוא את הפרמטרים $\{\underline{w},b\}$ ואת זה נעשה בעזרת דוגמאות שנאספו. יש מגוון דרכים ללמד מסווג, וכאמור, אנו נשתמש ב- FLDA בשל פשטותו היחסית. לפי התיאור הנ"ל ברור שכדאי לבחור את $\underline{w}$ כך שכל וקטורי האיריס מהזן הראשון יתקבצו קרוב אחד לשני לאחר ההטלה, כנ"ל לגבי ההטלה של וקטורי האיריס מהזן השני, ובנוסף, רצוי ששני מקבצי הטלות אלו יהיו רחוקים זה מזה במידת האפשר. נכתוב ביטוי שמתאר כל זאת:

$$\frac{\sum_{i=1}^{N_s}\sum_{j=1}^{N_m}\left(\underline{w}^T\underline{s}_i-\underline{w}^T\underline{m}_j\right)^2}{\sum_{i=1}^{N_s}\sum_{j=1}^{N_s}\left(\underline{w}^T\underline{s}_i-\underline{w}^T\underline{s}_j\right)^2+\sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_m}\left(\underline{w}^T\underline{m}_i-\underline{w}^T\underline{m}_j\right)^2}\to\max$$

המונה מודד את הריחוק בין צבירי הנקודות, והמכנה מכמת את ריכוזה של כל אחת מהקבוצות בנפרד. רישום שונה במעט של הביטוי הזה מוביל ל:

$$\frac{\underline{w}^T\sum_{i=1}^{N_s}\sum_{j=1}^{N_m}\left(\underline{s}_i-\underline{m}_j\right)\left(\underline{s}_i-\underline{m}_j\right)^T\underline{w}}{\underline{w}^T\left(\sum_{i=1}^{N_s}\sum_{j=1}^{N_s}\left(\underline{s}_i-\underline{s}_j\right)\left(\underline{s}_i-\underline{s}_j\right)^T+\sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_m}\left(\underline{m}_i-\underline{m}_j\right)\left(\underline{m}_i-\underline{m}_j\right)^T\right)\underline{w}}=\frac{\underline{w}^T\mathbf{A}\underline{w}}{\underline{w}^T\mathbf{B}\underline{w}}\to\max$$

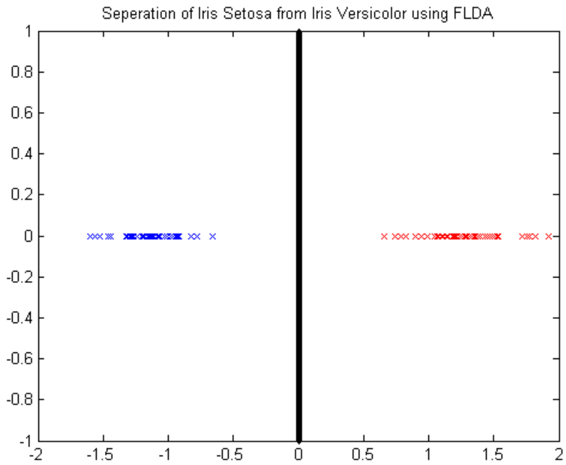
בעיה זו היא בדיוק בעיית הערכים העצמיים המוכללת. למעשה, $\underline{w}$ הינו הוקטור העצמי שמתאים לערך העצמי המוכלל הגדול ביותר של $\mathbf{A}\underline{x}=\lambda\mathbf{B}\underline{x}$ כאשר

$$\mathbf{A}=\sum_{i=1}^{N_s}\sum_{j=1}^{N_m}\left(\underline{s}_i-\underline{m}_j\right)\left(\underline{s}_i-\underline{m}_j\right)^T$$

$$\mathbf{B}=\left(\sum_{i=1}^{N_s}\sum_{j=1}^{N_s}\left(\underline{s}_i-\underline{s}_j\right)\left(\underline{s}_i-\underline{s}_j\right)^T+\sum_{i=1}^{N_m}\sum_{j=1}^{N_m}\left(\underline{m}_i-\underline{m}_j\right)\left(\underline{m}_i-\underline{m}_j\right)^T\right)$$

לשם חישוב הערך העצמי המוכלל בבעיה $\mathbf{A}\underline{x}=\lambda\mathbf{B}\underline{x}$ ישנן כמה גישות. אנו ננקוט בפשוטה שבהן - נחשב את הע"ע והו"ע של המטריצה $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$, כלומר את פתרונות המערכת $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\underline{x}=\lambda\underline{x}$. לשיטה זאת יש חסרונות אך לא נדון בהם כאן.

לאחר שחישבנו את $\underline{w}$ בעזרת השיטה הנ"ל, נותר לנו לקבוע את b. אנו נבחר אותו להיות הממוצע בין הערך הקטן ביותר בקבוצה שמוטלת לצד החיובי של המישור לבין הערך הגדול ביותר בקבוצה שמוטלת לצד השמאלי של המישור. להלן תוצאות ההפרדה של איריס Setosa מאיריס Versicolor בעזרת FLDA:



ניתן לראות כי מתקבלת הפרדה מוחלטת בין שתי הקבוצות. חשוב להבהיר שלא תמיד המזל יאיר אלינו פנים כמו במקרה זה, שכן הפרדת שתי קבוצות של וקטורים ע"י הטלה ליניארית אינה אפשרית במקרים רבים.

לסיכום, ראינו כאן כלי פשוט להפרדה בין שתי קבוצות. היתרון של כלי זה הוא הפשטות שלו. ברגע שחישבנו את וקטור ההטלה הליניארית, כל מה שנותר לעשות הוא להפעיל אותה על כל קלט חדש ולבדוק האם התוצאה גדולה או קטנה מאפס. ראוי לציין שפשטותו של כלי זה מהווה גם חסרון, מפני שהוא מתאים רק להפרדה של קבוצות פשוטות יחסית וייכשל עבור אובייקטים שאינם פרידים ליניארית. לשם כך ניתן להשתמש ב-NN שראינו בסעיף הקודם או בכלים אחרים של למידה. המתעניינים יכולים ללמוד את הקורס מבוא למערכות לומדות הניתן בפקולטה.