

1 Uvod

1.1 Uvod

– Ta odstavek je potrebno dopolniti!

Diskriminantna analiza se že dolga leta uporablja za določevanje lastnosti, ki poudarjajo razlike med razredi. Definirana je kot optimizacijski problem, ki vključuje kovariančne matrike, ki predstavljajo razpršenost podatkov znotraj posameznega razreda in razpršenost oziroma ločenost posameznih razredov. Diskriminantna analiza pa sama po sebi zahteva, da je ena od teh kovariančnih matrik nesingularna, kar omejuje njeno uporabo na matrikah določenih dimenzij. V nadaljevanju tako preučimo več različnih optimizacijskih kriterijev in poskušamo njihovo uporabo razširiti na vse matrike z uporabo posplošenega singularnega razcepa. Na ta način se izognemo pogoju nesingularnosti, ki ga zahteva diskriminantna analiza. Tako pridemo do posplošene diskriminantne analize, ki jo lahko uporabimo tudi, kadar je ena matrika singularna (v nadaljevanju lahko vidimo, da je matrika singularna, kadar je velikost vzorca manjša, kot pa je dimenzija posamezne meritve. V nadaljevanju bomo testirali učinkovitost posplošene diskriminantne analize in jo, kjer bo to mogoče, primerjali tudi z običajno diskriminantno analizo.

1.2 Matematični uvod

Cilj diskriminantne analize je združiti lastnosti originalnih podatkov na način, ki kar najučinkoviteje ločuje med razredi, v katerih so podatki. Pri takšnem združevanju lastnosti podatkov se dimenzija teh podatkov zmanjša tako, da se struktura teh podatkov in določenih razredov kar najbolje ohrani.

Predpostavimo, da so podatki zloženi v matriko $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, kjer m predstavlja dimenzijo posamezne meritve, n pa predstavlja število meritev oz. podatkov. Denimo, da so podatki v matriki A iz k različnih razredov. Tako so stolpci a_1, a_2, \dots, a_n matrike A združeni v k podmatrik, ki predstavljajo razrede, v katerih so podatki:

$$A = [A_1, A_2, \dots, A_k], \text{ kjer } A_i \in \mathbb{R}^{m \times n_i}.$$

Tu število n_i predstavlja moč indeksne množice razreda i . To indeksno množico razreda i označimo z N_i . Očitno velja tudi

$$\sum_{i=1}^k n_i = n.$$

Matriko A lahko poleg razdelitve na podmatrike razdelimo tudi na stolpce. Matrika $A = [a_{i,j}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je tako sestavljena iz n posameznih stolpcev, kjer i -ti stolpec označimo z a_i :

$$a_i = \begin{bmatrix} a_{1,i} \\ a_{2,i} \\ \vdots \\ a_{m,i} \end{bmatrix}.$$

Cilj diskriminantne analize je najti linearno preslikavo iz \mathbb{R}^m v \mathbb{R}^ℓ , ki v novem prostoru kar najboljše poudari razrede, v katerih so podatki. Tu navadno velja $\ell \leq m - 1$, torej da je prostor, v katerega ta linearna preslikava slika, manjdimenzionalen kot prvotni prostor. To iskano linearno preslikavo predstavimo z matriko $G^T \in \mathbb{R}^{\ell \times m}$. Za preslikavo G^T torej velja

$$G^T : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^\ell.$$

Torej preslikava G^T nek m -dimenzionalen vektor preslika v nov vektor v ℓ -dimezionalnem prostoru, v katerem so razredi podatkov poudarjeni, razpršenost podatkov znotraj razredov je zmanjšana, razlike med razredi pa so povečane.

Za nadaljnje izračune moramo definirati tudi centroid i -tega razreda, ki je izračunan kot povprečje stolpcev v i -tem razredu,

$$c^{(i)} = \frac{1}{n_i} \sum_{j \in N_i} a_j,$$

in centroid celotnih podatkov, ki je izračunan kot povprečje vseh stolpcev, to je

$$c = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n a_j.$$

Razpršenost podatkov znotraj posameznih razredov, razpršenost vseh podatkov ter razpršenost oziroma razlike med razredi je smiselno predstaviti s pomočjo matrik. Zato v nadaljevanju definiramo matriko

$$S_W = \sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} (a_j - c^{(i)})(a_j - c^{(i)})^T,$$

ki predstavlja matriko razpršenosti podatkov znotraj razredov, matriko

$$S_B = \sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} (c^{(i)} - c)(c^{(i)} - c)^T = \sum_{i=1}^k n_i (c^{(i)} - c)(c^{(i)} - c)^T,$$

ki predstavlja matriko razpršenosti oziroma razlik med razredi in matriko

$$S_M = \sum_{j=1}^n (a_j - c)(a_j - c)^T,$$

ki prstavlja matriko celotne razpršenosti podatkov. Vse tri matrike so velikosti $m \times m$. S pomočjo preslikave G^T pa jih preslikamo v matrike velikosti $\ell \times \ell$ na sledeč način:

$$S_W^\ell = G^T S_W G, \quad S_B^\ell = G^T S_B G, \quad S_M^\ell = G^T S_M G.$$

Iz danih matrik razpršenosti podatkov bi radi tvorili kriterij kvalitete strukture razredov. Kriterij kvalitete strukture razredov mora imeti visoko vrednost,

kadar so razredi, v katerih so podatki, strnjeni in dobro ločeni med seboj. Opazimo lahko, da $sled(S_W)$ predstavlja, kako skupaj so si podatki v posameznem razredu, saj velja

$$\begin{aligned} sled(S_W) &= \sum_{t=1}^m \left[\sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} (a_{t,j} - c_t^{(i)})^2 \right] = \sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} \left[\sum_{t=1}^m (a_{t,j} - c_t^{(i)})^2 \right] \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} \|a_j - c^{(i)}\|_2^2. \end{aligned}$$

Podobno $sled(S_B)$ predstavlja ločenost med razredi, saj velja

$$\begin{aligned} sled(S_B) &= \sum_{t=1}^m \left[\sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} (c_t^{(i)} - c_t)^2 \right] = \sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} \left[\sum_{t=1}^m (c_t^{(i)} - c_t)^2 \right] \\ &= \sum_{i=1}^k \sum_{j \in N_i} \|c^{(i)} - c\|_2^2 = \sum_{i=1}^k n_i \|c^{(i)} - c\|_2^2. \end{aligned}$$

Optimalna preslikava G^T tako maksimizira $sled(S_B^\ell)$ in minimizira $sled(S_W^\ell)$. Smislen maksimizacijski kriterij se tako zdi

$$sled(G^T S_B G) / sled(G^T S_W G),$$

ki pa ga zaradi lažjega računanja aproksimiramo kar s kriterijem

$$sled((S_W^\ell)^{-1} S_B^\ell).$$

Kljub temu, da je ta optimizacijski kriterij lažje izračunljiv ima svoje pomanjkljivosti. Opazimo lahko, da kriterija ne moremo uporabiti, ko je matrika S_W^ℓ singularna, torej kadar je njena determinanta enaka 0.

– ***Ali ta del sploh velja?***–

–**Če NE, kako lahko potem pokažem da singularni razcep res potrebujemo?** –

–**Če DA, kako lahko to dokažem/pokažem?** –

Iz singularnosti matrike S_W sledi singularnosti matrike S_W^ℓ .

–

Do te situacije pa lahko pride kar precej pogosto. Matrika $S_W \in \mathbb{R}^{m \times m}$ je singularna namreč v vseh primerih, ko za matriko $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ velja $m > n$, saj je potem po definiciji sestavljena kot vsota n matrik z rangom 1. $m \times m$ dimenzionalna matrika S_W ima tako rang manjši ali enak n , iz česar sledi, da je njena determinanta enaka 0. Na primer, do tega problema pride v primeru, ko je pridobivanje podatkov drago oz. zahtevno in so pridobljeni podatki visokih dimenzij (dimenzija posameznega podatka je večja od števila vseh pridobljenih podatkov).

Obstaja več načinov, kako aplicirati diskriminantno analizo na matriki $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ z $m > n$. V grobem jih ločimo na tiste, kjer dimenzijo podatkov zmanjšamo v dveh korakih, in na tiste, kjer dimenzijo podatkov zmanjšamo v enem

koraku. Pri prvem načinu se faza diskriminante analize nadaljuje v fazo, v kateri zanemarimo oblike posameznih razredov. Najpopularnejša metoda za prvi del tega procesa je zmanjšanje ranga matrike s pomočjo singularnega razcepa. To je tudi glavno orodje metode imenovane metoda glavnih komponent. Kakorkoli, celotna predstava dvostopenjskih načinov je precej občutljiva na zmanjšanje dimenzije v prvi fazi. V diplomskem delu se bomo osredotočili na način, ki posploši diskriminantno analizo tako, da teoretično optimalno zmanjša dimenzijo podatkov brez da bi uvedel dodaten korak. V ta namen bomo obravnavali kriterij

$$\text{sled}((S_2^\ell)^{-1}S_1^\ell),$$

kjer matriki S_2 in S_1 predstavljata poljubno matriko izmed S_W , S_B in S_M . Kadar je matrika S_2 nesingularna, klasična diskriminantna analiza predstavi svojo rešitev s pomočjo posplošenega problema lastnih vrednosti. S prestrukturiranjem problema tako, da uporabimo posplošeni singularni razcep, pa lahko razširimo uporabnost diskriminantne analize tudi na primer, ko je matrika S_2 singularna.

2 Matematična priprava - posplošeni singularni razcep

Originalna definicija posplošenega singularnega razcepa (Van Loan) je sledeča.

Izrek 1 (Posplošeni singularni izrek (Van Loan)). *Za matriki $K_A \in \mathbb{R}^{p \times m}$ z $p \geq m$ in $K_B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ obstajata ortogonalni matriki $U \in \mathbb{R}^{p \times p}$ in $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ter nesingularna matrika $X \in \mathbb{R}^{m \times m}$, da velja*

$$U^T K_A X = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_m \\ \hline & & & 0_{p-m,m} \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad V^T K_B X = \Sigma_{B_q},$$

kjer je $q = \min(n, m)$,

$$\Sigma_{B_q} = \begin{bmatrix} \beta_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \beta_q & & \\ \hline & & & 0_{n-q,q} & \\ & & & & 0_{n-q,m-q} \end{bmatrix},$$

$\alpha_i \geq 0$ za $1 \leq i \leq m$, $\beta_i \geq 0$ za $1 \leq i \leq q$ in $\beta_1 \geq \beta_2 \geq \dots \geq \beta_q$.

Dokaz. Iz matrik K_A in K_B tvorimo združeno $(p+n) \times m$ matriko $K = \begin{bmatrix} K_A \\ K_B \end{bmatrix}$, na kateri naredimo singularni razcep. Iz singularnega razcepa dobimo matriki

$Q \in \mathbb{R}^{(p+n) \times (p+n)}$ in matriko $Z_1 \in \mathbb{R}^{m \times m}$, tako da velja

$$Q^T \begin{bmatrix} K_A \\ K_B \end{bmatrix} Z_1 = \begin{bmatrix} \gamma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \gamma_m \\ \hline 0_{p+n-m, m} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

kjer za $k = \text{rang}(K)$ velja $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_k > \gamma_{k+1} = \dots = \gamma_m = 0$.

Matriko Z_1 razdelimo na dve matriki, matriko $Z_{11} \in \mathbb{R}^{m \times k}$, ki je sestavljena iz prvih k stolpcev matrike Z_1 in matriko $Z_{12} \in \mathbb{R}^{m \times (m-k)}$, ki je sestavljena iz preostalih $m - k$ stolpcev matrike Z_1 . Pišemo

$$Z_1 = [Z_{11} \ Z_{12}].$$

Po predpostavki velja $p \geq m$ in ker je očitno tudi $m \geq k$ sledi $p \geq m \geq k$. Sedaj definirajmo matriko

$$D := \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_k) \in \mathbb{R}^{k \times k}.$$

Tako iz zgornje enačbe (??) dobimo

$$\begin{bmatrix} K_A Z_{11} & K_A Z_{12} \\ K_B Z_{11} & K_B Z_{12} \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} D & 0_{k, m-k} \\ 0_{p+n-k, k} & 0_{p+n-k, m-k} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

od koder sledi

$$\begin{bmatrix} K_A Z_{11} \\ K_B Z_{11} \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix}.$$

V kolikor še matriko Q razdelimo na podmatrike na naslednji način

$$Q = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix},$$

kjer je matrika $Q_{11} \in \mathbb{R}^{p \times k}$, matrika $Q_{12} \in \mathbb{R}^{p \times (p+n-k)}$, matrika $Q_{21} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ in matrika $Q_{22} \in \mathbb{R}^{n \times (p+n-k)}$, ugotovimo, da je

$$Q \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} D \\ Q_{21} D \end{bmatrix}.$$

Iz tega neposredno sledi enakost

$$K_A Z_{11} = Q_{11} D \implies K_A Z_{11} D^{-1} = Q_{11} =: K_{A_1} \in \mathbb{R}^{p \times k}$$

in enakost

$$K_B Z_{11} = Q_{21} D \implies K_B Z_{11} D^{-1} = Q_{21} =: K_{B_1} \in \mathbb{R}^{n \times k}.$$

Sedaj singularni razcep naredimo na matriki K_{B_1} . Za matriko K_{B_1} vemo, da ima isti rang kot matrika K_B , saj velja, da je matrika Z_{11} polnega ranga (je namreč podmatrika ortogonalne matrike Z) in vemo, da je matrika D^{-1} polnega ranga.

Označimo $r = \text{rang}(K_B) = \text{rang}(K_{B_1})$. Iz singularnega razcepa za matriko K_{B_1} dobimo ortogonalni matriki $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ in $Z_2 \in \mathbb{R}^{k \times k}$, da velja

$$V^T K_{B_1} Z_2 = \Sigma_{B_t}, \quad (3)$$

kjer je $t = \min\{n, k\}$, $\Sigma_{B_t} = \begin{bmatrix} \beta_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \beta_t & & & \\ \hline & & & 0_{t, k-t} & & \\ & & & & \ddots & \\ \hline & & 0_{n-t, t} & & & 0_{n-t, k-t} \end{bmatrix}$ in velja $\beta_1 \geq \beta_2 \geq$

$$\dots \geq \beta_r > \beta_{r+1} = \dots = \beta_t = 0.$$

Iz enačbe (??) sledi, da je

$$K_B Z_{12} = 0_{n, m-k}.$$

Opazimo, da velja tudi

$$\begin{aligned} V^T K_B Z_1 \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix} &= V^T K_B [Z_{11} \ Z_{12}] \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix} = \\ V^T K_B [Z_{11} D^{-1} Z_2 \ Z_{12}] &= [V^T K_B Z_{11} D^{-1} Z_2 \ V^T K_B Z_{12}] = \\ [V^T K_{B_1} Z_2 \ 0_{n, m-k}] &= [\Sigma_{B_t} \ 0_{n, m-k}] = \\ \begin{bmatrix} \beta_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \beta_t & & & \\ \hline & & & 0_{t, m-t} & & \\ & & & & \ddots & \\ \hline & & 0_{n-t, t} & & & 0_{n-t, m-t} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Če za $q = \min\{n, m\}$ dodatno definiramo še $\beta_{t+1} = \dots = \beta_q = 0$, dobimo ravno

$$V^T K_B Z_1 \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \beta_q & & & \\ \hline & & & 0_{q, m-q} & & \\ & & & & \ddots & \\ \hline & & 0_{n-q, q} & & & 0_{n-q, m-q} \end{bmatrix},$$

kar je pa ravno matrika Σ_{B_q} iz izreka. Matriko X tako definiramo na sledeči način

$$X := Z_1 \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix}.$$

Dokazati pa moramo tudi, da zgornja matrika X ustreza tudi enačbi iz izreka za matriko K_A , torej, da obstaja tudi taka matrika U , da velja

$$U^T K_A X = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \alpha_m & & & \\ \hline & & & 0_{p-m, m} & & \end{bmatrix}.$$

Ker je matrika Q ortogonalna, dodatno velja $K_{A_1}^T K_{A_1} + K_{B_1}^T K_{B_1} = I_k$, kjer je I_k identična matrika dimenzije $k \times k$. To enakost lahko pokažemo tako, da razpišemo spodnjo enačbo

$$\begin{aligned} Q^T Q &= \begin{bmatrix} Q_{11}^T & Q_{21}^T \\ Q_{12}^T & Q_{22}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11}^T Q_{11} + Q_{21}^T Q_{21} & Q_{11}^T Q_{12} + Q_{21}^T Q_{22} \\ Q_{12}^T Q_{11} + Q_{22}^T Q_{21} & Q_{12}^T Q_{12} + Q_{22}^T Q_{22} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} K_{A_1}^T K_{A_1} + K_{B_1}^T K_{B_1} & Q_{11}^T Q_{12} + Q_{21}^T Q_{22} \\ Q_{12}^T Q_{11} + Q_{22}^T Q_{21} & Q_{12}^T Q_{12} + Q_{22}^T Q_{22} \end{bmatrix} = I = \begin{bmatrix} I_k & 0 \\ 0 & I_{p+n-k} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Definirajmo matriko G , ki jo dobimo s preoblikovanjem enačbe (??):

$$G := K_{B_1} Z_2 = V \Sigma_{B_t} \in \mathbb{R}^{n \times k}.$$

Za matriko $K_{A_1} Z_2$ izračunamo razširjen QR razcep, $K_{A_1} Z_2 = UR$, kjer je $U \in \mathbb{R}^{p \times p}$ ortogonalna in $R \in \mathbb{R}^{p \times k}$ zgornja trapezna matrika. Tak razcep lahko naredimo na primer z uporabo Householderjevih zrcaljenj.

Opazimo lahko, da so stolpci matrike $K_{A_1} Z_2$ medsebojno ortogonalni, saj velja

$$\begin{aligned} (K_{A_1} Z_2)^T (K_{A_1} Z_2) &= Z_2^T K_{A_1}^T K_{A_1} Z_2 = Z_2^T (I_k - K_{B_1}^T K_{B_1}) Z_2 = \\ &= Z_2^T Z_2 - Z_2^T K_{B_1}^T K_{B_1} Z_2 = I_k - G^T G = I_k - \Sigma_{B_t}^T V^T V \Sigma_{B_t} \\ &= I_k - \begin{bmatrix} \beta_1^2 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \beta_t^2 & & \\ & & & 0_{t,k-t} & \\ 0_{k-t,k-t} & & & & 0_{t,k-t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \beta_1^2 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 - \beta_t^2 & & \\ & & & 0_{k-t,k-t} & \\ & & & & I_{t,k-t} \end{bmatrix} \\ &= \text{diag}(1 - \beta_1^2, \dots, 1 - \beta_k^2), \end{aligned}$$

kjer smo dodatno definirali še $\beta_{t+1} = \dots = \beta_k = 0$. Iz tega sledi, da je matrika R oblike

$$R = \begin{bmatrix} \sqrt{1 - \beta_1^2} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sqrt{1 - \beta_k^2} & \\ & & & 0_{p-k,k} \end{bmatrix},$$

saj velja

$$(K_{A_1} Z_2)^T (K_{A_1} Z_2) = R^T U^T U R = R^T R = \text{diag}(1 - \beta_1^2, \dots, 1 - \beta_k^2).$$

Velja tudi

$$\begin{aligned}
U^T K_A Z_1 \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix} &= U^T K_A [Z_{11} \ Z_{12}] \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix} = \\
U^T K_A [Z_{11} D^{-1} Z_2 \ Z_{12}] &= [U^T K_A Z_{11} D^{-1} Z_2 \ U^T K_A Z_{12}] = \\
[U^T K_{A_1} Z_2 \ 0_{p,m-k}] &= [U^T U R \ 0_{p,m-k}] = [R \ 0_{p,m-k}] = \\
&\begin{bmatrix} \alpha_i & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \alpha_k & & \\ & & & 0_{k,m-k} & \\ \cdots & & & & \ddots \\ 0_{p-k,k} & & & & 0_{p-k,m-k} \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

kjer smo dodatno definirali $\alpha_i = \sqrt{1 - \beta_i^2}$ za $i = 1, \dots, k$ in $\alpha_{k+1} = \dots = \alpha_m$. S tem smo pokazali, da matrika

$$X = Z_1 \begin{bmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{bmatrix}$$

zadošča tako razcepu matrike K_A kot tudi razcepu matrike K_B iz izreka in s tem dokazali izrek. \square

Problem tega izreka pa je, da se ga ne da uporabiti, kadar dimenzije matrike K_A niso ustrezne. Zaradi tega pretirano zavezujočega pogoja se odločita C.C. Paige in M.A. Saunders ta posplošeni singularni izrek še dodatno posplošiti. Tako dobimo naslednji izrek:

Izrek 2 (Posplošeni singularni razcep (Paige in Saunders)). *Naj bosta dani matriki $K_A \in \mathbb{R}^{p \times m}$ in $K_B \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Potem za $K = \begin{bmatrix} K_A \\ K_B \end{bmatrix}$ in $k = \text{rang}(K)$ obstajajo ortogonalne matrike $U \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $W \in \mathbb{R}^{k \times k}$ in $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$, da velja*

$$U^T K_A Q = \Sigma_A \begin{bmatrix} W^T R, & 0 \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad V^T K_B Q = \Sigma_B \begin{bmatrix} W^T R, & 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

kjer sta

$$\Sigma_A = \begin{bmatrix} I_A & & \\ & D_A & \\ & & 0_A \end{bmatrix} \quad \text{in} \quad \Sigma_B = \begin{bmatrix} 0_B & & \\ & D_B & \\ & & I_B \end{bmatrix},$$

$R \in \mathbb{R}^{k \times k}$ je nesingularna matrika, matriki $I_A \in \mathbb{R}^{r \times r}$ in $I_B \in \mathbb{R}^{(k-r-s) \times (k-r-s)}$ identični matriki, kjer je

$$r = \text{rang}(K) - \text{rang}(K_B) \quad \text{in} \quad s = \text{rang}(K_A) + \text{rang}(K_B) - \text{rang}(K),$$

$0_A \in \mathbb{R}^{(p-r-s) \times (k-r-s)}$ in $0_B \in \mathbb{R}^{(n-k+r) \times r}$ ničelni matriki, ki imata lahko tudi ničelno število vrstic ali stolpcev, matriki $D_A = \text{diag}(\alpha_{r+1}, \dots, \alpha_{r+s})$ in $D_B = \text{diag}(\beta_{r+1}, \dots, \beta_{r+s})$ pa diagonalni matriki, ki zadoščata pogoju

$$1 > \alpha_{r+1} \geq \dots \geq \alpha_{r+s} > 0 \quad \text{in} \quad 0 < \beta_{r+1} \leq \dots \leq \beta_{r+s} < 1$$

pri $\alpha_i^2 + \beta_i^2 = 1$ za $i = r+1, \dots, r+s$.

Dokaz. Izračunamo singularni razcep matrike K . Tako dobimo ortogonalni matriki $P \in \mathbb{R}^{(p+n) \times (p+n)}$ in $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$, da velja

$$PKQ^T = \begin{bmatrix} R & 0_{k,m-k} \\ 0_{n+p-k,k} & 0_{n+p-k,m-k} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

kjer je $R \in \mathbb{R}^{k \times k}$ diagonalna matrika ranga k . Matriki Q in P razdelimo na podmatrike

$$Q = [Q_1 \ Q_2] \quad \text{in} \quad P = [P_1 \ P_2] = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{bmatrix},$$

kjer je matrika $Q_1 \in \mathbb{R}^{m \times k}$ sestavljena iz prvih k stolpcev matrike Q , matrika $Q_2 \in \mathbb{R}^{m \times (m-k)}$ pa iz preostalih $m-k$ stolpcev matrike Q , podmatrike matrike P pa so sledečih dimenzij: $P_{11} \in \mathbb{R}^{p \times k}$, $P_{12} \in \mathbb{R}^{p \times (p+n-k)}$, $P_{21} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ in $P_{22} \in \mathbb{R}^{n \times (p+n-k)}$.

Ker je P ortogonalna matrika velja $\|P\|_2 \leq 1$ in posledično tudi $\|P_{11}\|_2 \leq \|P_1\|_2 \leq \|P\|_2 \leq 1$. Posledično nobena singularna vrednost matrike P_{11} ni večja od 1.

Singularni razcep podobno kot na matriki K naredimo tudi na matriki P_{11} . Tako dobimo ortogonalni matriki $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ in $W \in \mathbb{R}^{k \times k}$, da velja

$$U^T P_{11} W = \Sigma_A,$$

kjer je

$$\Sigma_A = \begin{bmatrix} I_r & & \\ & D_A & \\ & & 0_A \end{bmatrix},$$

kjer je r geometrična večkratnost lastne vrednosti 1, matrika I_r identična ma-

trika dimenzije $r \times r$, matrika $D_A = \begin{bmatrix} \alpha_{r+1} & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_{r+s} \end{bmatrix}$ diagonalna matrika,

kjer $r+s$ predstavlja rang matrike P_{11} in $0_A \in \mathbb{R}^{(p-r-s) \times (k-r-s)}$ je ničelna matrika, ki ima lahko nič vrstic ali nič stolpcev.

Matriko $P_{21}W$ množimo z ortogonalnimi transformacijami tako, da uničimo vse elemente v zgornjem delu matrike $P_{21}W$. Tako dobimo ortogonalno in simetrično matriko V , da velja $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$, da velja

$$V^H P_{21} W = L = (\ell_{ij})_{i,j} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & L_1 \end{bmatrix},$$

kjer je matrika L_1 spodnjetrokotna z diagonalnimi elementi večjimi od 0. Matrika ortogonalnih transformacij V je tu sestavljena kot produkt matrik Householderjevih zrcaljenj $\tilde{P}_1, \tilde{P}_2, \dots, \tilde{P}_k$, ki jih dobimo tako, da začnemo elemente zgornjega dela matrike $P_{21}W$ uničevati iz desne proti levi in za to uporabimo manj stabilno verzijo Householderjevih zrcaljenj, tako, da je zadoščeno pogoju, da so diagonalni elementi matrike L_1 večji od 0. Velja torej

$$V = \tilde{P}_1 \tilde{P}_2 \dots \tilde{P}_k,$$

kjer je $\tilde{P}_k = I - \frac{2}{w_k^T w_k} w_k w_k^T$, $w_k = x_k - \|x_k\|_2 e_n$, kjer e_n predstavlja enotski vektor z enico na n -tem mestu, x_j pa predstavlja j -ti stolpec matrike $P_{21}W$.

Opazimo lahko, da velja spodnja enakost

$$\begin{bmatrix} U^T & 0_{m,n} \\ 0_{n,m} & V^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{11} \\ P_{21} \end{bmatrix} W = \begin{bmatrix} U^T P_{11} W \\ V^T P_{21} W \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_A \\ L \end{bmatrix}.$$

Zgornja matrika $\begin{bmatrix} \Sigma_A \\ L \end{bmatrix}$ je ortogonalna, saj je produkt ortogonalnih matrik. To implicira obliko matrike $\begin{bmatrix} \Sigma_A \\ L \end{bmatrix}$, torej

$$\begin{bmatrix} \Sigma_A \\ L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_r & & & \\ & D_A & & \\ & & 0_{m-r-s, k-r-s} & \\ & 0_{p-k+r, r} & & \\ & & D_B & \\ & & & I_{k-r-s, k-r-s} \end{bmatrix},$$

kjer je matrika D_B diagonalna matrika $D_B = \begin{bmatrix} \beta_{r+1} & & \\ & \ddots & \\ & & \beta_{r+s} \end{bmatrix}$. Za ma-

triko L pa velja $L = \Sigma_B = \begin{bmatrix} 0_{p-k+r, r} & & \\ & D_B & \\ & & I_{k-r-s, k-r-s} \end{bmatrix}$. Iz ortogonalno-

sti matrike $\begin{bmatrix} \Sigma_A \\ L \end{bmatrix}$ sledi tudi, da so njeni stolpci ortonormirani, iz česar sledi $\alpha_{r+i}^2 + \beta_{r+i}^2 = 1$ za $i = 1, \dots, s$.

Iz enačbe (??) dobimo

$$\begin{bmatrix} K_A \\ K_B \end{bmatrix} Q = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R & 0_{k, m-k} \\ 0_{n+p-k, k} & 0_{n+p-k, m-k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{11}R & 0_{m, m-k} \\ P_{21}R & 0_{p, m-k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U\Sigma_A W^T R & 0_{m, m-k} \\ V\Sigma_B W^T R & 0_{p, m-k} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

iz česar sledi

$$P_{11} = U\Sigma_A W^T \text{ in } P_{21} = V\Sigma_B W^T.$$

Če začetno enačbo iz enačbe (??) pomnožimo iz leve z matriko $\begin{bmatrix} U^T & 0_{m,n} \\ 0_{n,m} & V^T \end{bmatrix}$ dobimo

$$\begin{bmatrix} U^T & 0_{m,n} \\ 0_{n,m} & V^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_A \\ K_B \end{bmatrix} Q = \begin{bmatrix} U^T & 0_{m,n} \\ 0_{n,m} & V^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U\Sigma_A W^T R & 0_{m, m-k} \\ V\Sigma_B W^T R & 0_{p, m-k} \end{bmatrix},$$

iz česar sledi

$$U^T K_A Q = \Sigma_A \begin{bmatrix} W^T R, & 0 \end{bmatrix} \text{ in } V^T K_B Q = \Sigma_B \begin{bmatrix} W^T R, & 0 \end{bmatrix},$$

s čimer smo dokazali izrek. \square

Iz posplošenega singularnega razcepa, ki sta ga definirala Paige in Saunders neposredno sledi Van Loanova posplošitev singularnega razcepa. S preoblikovanjem enačbe (??), dobimo

$$U^T K_A Q = \begin{bmatrix} \Sigma_A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^T R & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}.$$

Inverz matrike $\begin{bmatrix} W^T R & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}$ je kar matrika $\begin{bmatrix} R^{-1} W & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}$, saj veljata obe enakosti iz definicije inverza, torej

$$\begin{bmatrix} R^{-1} W & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W^T R & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} = I \quad \text{in} \quad \begin{bmatrix} W^T R & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R^{-1} W & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} = I.$$

Tako tu očitno sledi

$$U^T K_A Q \begin{bmatrix} R^{-1} W & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_A & 0 \end{bmatrix}.$$

Matriko X definiramo kot

$$Q \begin{bmatrix} R^{-1} W & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

in dobimo ravno Van Loanovo posplošitev razcepa

$$U^T K_A X = \begin{bmatrix} \Sigma_A & 0 \end{bmatrix}.$$

Podobno lahko pokažemo tudi za matriko K_B , za katero iz enačbe (??) dobimo

$$V^T K_B X = \begin{bmatrix} \Sigma_B & 0 \end{bmatrix}.$$

Tako je definirana matrika X ravno iskana matrika iz prve posplošitve singularnega razcepa in matriki $\begin{bmatrix} \Sigma_A & 0 \end{bmatrix}$ in $\begin{bmatrix} \Sigma_B & 0 \end{bmatrix}$ ravno iskani diagonalni matriki.

Za nadaljnje delo definirajmo matrike

$$H_W := \begin{bmatrix} A_1 - c^{(1)} e^{(1)T}, \dots, A_k - c^{(k)} e^{(k)T} \end{bmatrix},$$

$$H_B := \begin{bmatrix} (c^{(1)} - c) e^{(1)T}, \dots, (c^{(k)} - c) e^{(k)T} \end{bmatrix}$$

in

$$H_M := [a_1 - c, \dots, a_n - c] = A - c e^T = H_W + H_B,$$

kjer velja $e^{(i)} = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{n_i \times 1}$ in $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$.

S pomočjo teh matrik lahko definiramo tudi matrike razpršenosti podatkov. Matriko S_W lahko definiramo kot produkt matrike H_W z njeno transponiranko, torej

$$S_W = H_W H_W^T,$$

matriko S_B lahko definiramo na podoben način kot

$$S_B = H_B H_B^T,$$

prav tako pa tudi matriko S_M

$$S_M = H_M H_M^T.$$

S pomočjo tega razcepa lahko tudi na drugačen način pokažemo, da je matrika S_W , kadar velja $m > n$, singularna. Razvidno je namreč, da je ta matrika S_W definirana kot produkt dveh matrik, kjer je matrika H_W dimenzije $m \times n$, matrika H_W^T pa dimenzije $n \times m$. V kolikor velja $m > n$, sta tako ti dve matrike največ ranga n . Ker pa za rang matrike velja, da je rang produkta dveh matrik navzgor omejen z manjšim izmed rangov teh dveh posameznih matrik ($\text{rang}(AB) \leq \min(\text{rang}(A), \text{rang}(B))$), je posledično tudi matrika S_W največ ranga n in torej očitno singularna.

– **Tu mogoče dopiši glede matrik K_A in K_B**

3 Matematična rešitev problema

V tem odstavku prikažemo uporabo posplošenega singularnega razcepa v namen razširjene uporabe posplošene diskriminantne analize.

3.1 Optimizacija optimizacijskega kriterija $J_1 = \text{sled}(S_2^{-1} S_1)$ za nesingularno matriko S_2

Tu izhajamo iz optimizacije optimizacijskega kriterija

$$J_1(G) = \text{sled}((G^T S_2 G)^{-1} (G^T S_1 G))$$

z izbiro optimalne preslikave G , kjer sta matriki S_1 in S_2 izbrani izmed matrik S_W , S_B in S_M . Ko je matrika S_2 nesingularna, je sestavljena kot produkt matrike in transponiranke te matrike in je zato simetrično pozitivno definitna (posledično so vse lastne vrednosti te matrike večje ali enake 0). Za simetrično pozitivno definitno matriko pa obstaja razcep Choleskega; tako vemo da obstaja spodnjetrokotna matrika V s pozitivnimi elementi na diagonalni, da velja:

$$S_2 = V V^T.$$

Oglejmo si posplošeni problem lastnih vrednosti za matriki S_2 in S_1 , kjer za ti dve matriki iščemo takšen $\lambda \in \mathbb{R}$ in takšen neničelen vektor $x \in \mathbb{R}^m$, da velja

$$S_1 x = \lambda S_2 x. \quad (7)$$

Če sedaj matriko S_2 nadomestimo z matriko $V V^T$, ki jo dobimo iz razcepa Choleskega dobimo

$$S_1 x = \lambda V V^T x = V \lambda V^T x,$$

kar lahko iz leve pomnožimo z V^{-1} , saj vemo da za matriko V obstaja inverz, in tako dobimo

$$V^{-1}S_1x = \lambda V^Tx.$$

Enačbo lahko dodatno razčlenimo

$$V^{-1}S_1V^{-T}V^Tx = \lambda V^Tx.$$

Ker je matrika S_1 simetrična, je tudi matrika $V^{-1}S_1V^{-T}$ simetrična, saj velja

$$(V^{-1}S_1V^{-T})^T = (V^{-T})^TS_1^T(V^{-1})^T = V^{-1}S_1V^{-T}.$$

Simetrično matriko pa lahko diagonaliziramo v bazi ortonormiranih lastnih vektorjev in tako dobimo takšno matriko Y , da velja $YY^T = Y^TY$ in

$$V^{-1}S_1V^{-T} = Y\Lambda Y^T,$$

kjer je $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$ diagonalna matrika. S preoblikovanjem zgornje enačbe pa lahko dobimo

$$S_1 = VY\Lambda Y^TV^T = X\Lambda X^T,$$

kjer smo dodatno definirali $X := VY$. Matriko S_2 pa preoblikujemo

$$S_2 = VV^T = VY Y^TV^T = XX^T.$$

Ker ima matrika X inverz, lahko zgornji enačbi tudi obrnemo, tako da je $X^TS_1X = \Lambda$ in $X^TS_2X = I_m$. Iz posplošenega problema lastnih vrednosti (??) lahko vidimo, da sta λ_i in x_i ravno lastna vrednosti in lastni vektor za dano lastno vrednost λ_i za matriko $S_2^{-1}S_1$. Ker je matrika S_1 simetrična pozitivno definitna, vemo, da so vse njene lastne vrednosti $\lambda_i \geq 0$ za $i = 1, \dots, m$. Z uporabo permutacijskih matrik, lahko matriko Λ preuredimo tako, da za $q := \text{rang}(S_1)$ velja $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_q > \lambda_{q+1} = \dots = \lambda_m = 0$.

Optimizacijski kriterij ima tako sledečo obliko

$$\begin{aligned} J_1(G) &= \text{sled}((G^TS_2G)^{-1}G^TS_1G) \\ &= \text{sled}((G^TX^{-T}X^{-1}G)^{-1}G^TX^{-T}\Lambda X^{-1}G) \\ &= \text{sled}((\tilde{G}^T\tilde{G})^{-1}\tilde{G}^T\Lambda\tilde{G}), \end{aligned} \tag{8}$$

kjer je matrika $\tilde{G} := X^{-1}G \in \mathbb{R}^{m \times \ell}$. Ker vemo, da ima matrik X poln rang, ima matrika \tilde{G} rang enak številu stolpec, torej ℓ in tako lahko na njen naredimo QR razcep in tako dobimo matriko $Q \in \mathbb{R}^{m \times \ell}$, ki ima ortonormirane stolpce in nesingularno matriko $R \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$, da velja $\tilde{G} = QR$. Tako lahko zgornjo enačbo (??) dodatno preoblikujemo

$$\begin{aligned} J_1(G) &= \text{sled}(((QR)^TQR)^{-1}(QR)^T\Lambda QR) \\ &= \text{sled}((R^TQ^TQR)^{-1}R^TQ^T\Lambda QR) \\ &= \text{sled}((R^TR)^{-1}R^TQ^T\Lambda QR) \\ &= \text{sled}((R)^{-1}Q^T\Lambda QR), \end{aligned}$$

ker pa vemo, da imata podobni matriki enako sled, lahko to matriko z leve množimo z R , z desne pa z R^{-1} in tako dobimo

$$\begin{aligned} J_1(G) &= \text{sled}(Q^T \Lambda Q R(R)^{-1}) \\ &= \text{sled}(Q^T \Lambda Q). \end{aligned}$$

Tako lahko vidimo, da ko smo matriki S_1 in S_2 enkrat diagonalizirali, je maksimizacija optimizacijskega kriterija odvisna le še od matrik Q , ki predstavljajo ortonormirano bazo za matriko $X^{-1}G$, torej

$$\max_G J_1(G) = \max_{Q^T Q = I} \text{sled}(Q^T \Lambda Q),$$

ker pa vemo, da je sled matrike enaka vsoti lastnih vrednosti in da ima matrika Q ortonormirane stolpce, velja

$$\begin{aligned} \max_{Q^T Q = I} \text{sled}(Q^T \Lambda Q) \\ \leq \lambda_1 + \dots + \lambda_q \\ \text{sled}(S_2^{-1} S_1). \end{aligned}$$

3.2 Posplošitev maksimizacijskega kriterija $\text{sled}((S_W^Y)^{-1} S_B^Y)$ za singularno matriko S_2

4 Algoritem

5 Zaključek

6 Priloge

Izrek 3 (Singularni razcep). *Za vsako matriko $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, z lastnostjo $m \geq n$, obstaja singularni razcep*

$$A = U \Sigma V^T,$$

kjer sta $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ in $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonalni matriki, $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je oblike

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_n & \\ & & & \end{bmatrix}$$

in $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$ so singularne vrednosti matrike A .

Dokaz. Ker je $A^T A$ simetrična pozitivno semidefinitna matrika, so vse njene lastne vrednosti nenegativne. Označimo in uredimo jih kot

$$\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \dots \geq \sigma_n^2 \geq 0.$$

Ustrezni ortonormirani lastni vektorji v_1, \dots, v_n zadoščajo $A^T A v_i = \sigma_i^2 v_i$ za $i = 1, \dots, n$. Naj bo $\sigma_r > 0$ in $\sigma_{r+1} = \dots = \sigma_n = 0$. Matriko V razdelimo na $V_1 = [v_1, \dots, v_r]$ in $V_2 = [v_{r+1}, \dots, v_n]$. Iz

$$(AV_2)^T (AV_2) = V_2^T A^T A V_2 = V_2^T [0, \dots, 0] = 0$$

sledi $AV_2 = 0$. Sedaj definiramo $u_i := \frac{1}{\sigma_i} A v_i$ za $i = 1, \dots, r$. Vektorji u_1, \dots, u_r so ortonormirani, saj je

$$u_i^T u_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T A^T A v_j = \frac{\sigma_j}{\sigma_i} v_i^T v_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, r,$$

kjer smo v zapisu uproabili t.i. *Kroneckerjev delta*, definiran z $\delta_{ij} = 1$ za $i = j$ in $\delta_{ij} = 0$ za $i \neq j$. Označimo $U_1 = [u_1 \ \dots \ u_r]$ in dopolnimo z $U_2 = [u_{r+1} \ \dots \ u_n]$, da je $U = [U_1 \ U_2]$ ortogonalna matrika. Matrika $U^T A V$ ima obliko

$$U^T A V = \begin{bmatrix} U_1^T A V_1 & U_1^T A V_2 \\ U_2^T A V_1 & U_2^T A V_2 \end{bmatrix}.$$

Desna bloka sta zaradi $AV_2 = 0$ enaka 0. Za $i = 1, \dots, r$ in $k = 1, \dots, m$ velja

$$u_k^T A v_i = \sigma_i u_k^T u_i = \sigma_i \delta_{ik},$$

torej $U_2^T A V_1 = 0$ in $U_1^T A V_1 = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$. Dobimo singularni razcep $A = U \Sigma V^T$, kjer je $S = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ in

$$\Sigma = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

□

V primeru, ko velja $n > m$, dobimo singularni razcep za $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ tako, da transponiramo singularni razcep A^T .

7 Viri