

# 1 Uvod

## 1.1 Abstraktni uvod

Diskriminantna analiza se že dolga leta uporablja za določevanje lastnosti, ki ohranjajo razlike med razredi. Definirana je kot optimizacijski problem, ki vključuje kovariančne matrike, ki predstavljajo razprešenost 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. Na ta način dobimo posplošeno diskriminantno analizo, ki jo lahko uporabimo tudi kadar je ena matrika nesingularna (v nadaljevanju lahko vidimo, da je matrika nesingularna kadar je velikost vzorca manjša kot pa dimenzija posamezne meritve – **NEJASNOST!**). V nadaljevanju bom testiral učinkovitost posplošene diskriminantne analize in jo, kjer bo to mogoče, primerjal tudi z običajno diskriminantno analizo.

## 1.2 Matematični uvod

Cilj diskriminantne analize je združevati 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 na način, ki najboljše ohranja strukture določenih razredov.

Tu predpostavimo, da so podatki zloženi v matiko  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , 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:

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

Cilj diskriminantne analize je najti preslikavo  $G^T$ , ki v novem, manjdimenzionalnem prostoru, kar najboljše ohranja razrede, v katerih so podatki. Za preslikavo  $G^T$  torej velja:

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

kjer je  $\ell \leq m - 1$ . Torej preslikava  $G^T$  nek  $m$ -dimenzionalen vektor preslika v nov vektor v  $\ell$ -dimezionalnem prostoru (navadno velja  $\ell \leq m$ ), v katerem so razredi podatkov ohranjeni, razpršenost podatkov znotraj razredov je zmanjšana, razlike med razredi pa se povečajo.

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

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

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

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

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

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

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, ki predstavlja matriko razpršenosti podatkov znotraj razredov:

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

matriko, ki predstavlja matriko razpršenosti oz razlik med razred:

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

in matriko celotne razpršenosti podatkov:

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

Med zgoraj definiranimi matrikami velja tudi enakost:  $S_M = S_W + S_B$ . – **DOKAŽI (pozneje, ko vpelješ še matrike H)**

S pomočjo preslikave  $G^T$  preslikamo v  $\ell$ -dimezionalen prostor tudi matrike  $S_W$ ,  $S_B$  in  $S_M$ :

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

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  $\text{sled}(S_W)$  predstavlja, kako skupaj so si podatki v posameznem razredu, saj velja:

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

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

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

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

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

ki pa ga zaradi težke izračunljivosti aproksimiramo kar z kriterijem

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

#### – NEJASNOST!

Kljub temu, da je ta optimizacijski kriterij lažje izračunljiv ima svoje pomanjkljivosti. Opazimo lahko, da kriterij lahko uporabimo le v primeru, ko je matrika  $S_W^\ell$  nesingularna oziroma da kriterija nemoremo uporabiti, ko je matrika  $S_W^\ell$  singularna (torej kadar je njena determinanta enaka 0). Ker pa za determinanto matrike velja linearnost, ki jo v našem primeru uporabimo na sledeči način:

$$det(S_W^\ell) = det(G^T S_W G) = det(G^T) \cdot det(S_W) \cdot det(G),$$

je  $det(S_W^\ell)$  enaka 0 kadar je  $det(S_W)$  enaka 0, torej kadar je matrika  $S_W$  singularna. 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 je za matriko  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  velja  $m > n$ , saj je potem  $m$ -dimenzionalna matrika  $S_W$ , ki je sestavljena iz  $n$  vektorjev (iz  $a_j - c^{(i)}$  za  $\forall i \in \{1, \dots, k\}$  in  $\forall j \in N_j$ ). Iz  $n$  vektorjev pa lahko sestavimo le  $n$  dimenzionalen prostor, torej bo  $m \times m$  matrika iz teh vektorjev očitno singularna. Njena determinanta bo tako 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).

Poznamo 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. V 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 principalna komponentna analiza. Kakorkoli, celotna predstava dvostopenjskih načinov je precej občutljiva na zmanjšanje dimenzije v prvi fazi. Sam se bom v svojem diplomskem delu bolj osredotočil na način, ki posploši diskriminantno analizo tako, da teoretično optimalno zmanjša dimenzijo podatkov, brez ba bi uvedel dodaten korak.

V ta namen obravnavamo kriterij

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

kjer sta matriki  $S_2$  in  $S_1$  izbrani iz matrik  $S_W, S_B$  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)

**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*

$$U^T K_A X = \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_m) \text{ in } V^T K_B X = \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_q),$$

kjer  $q = \min(n, m)$ ,  $\alpha_i \geq 0$  za  $1 \leq i \leq m$  in  $\beta_i \geq 0$  za  $1 \leq i \leq q$ .

*Dokaz.* Iz matrik  $K_A$  in  $K_B$  tvorimo združeno matriko  $K = \begin{pmatrix} K_A \\ K_B \end{pmatrix}$ , 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

$$Q^T \begin{pmatrix} K_A \\ K_B \end{pmatrix} Z_1 = \text{diag}(\gamma_1, \dots, \gamma_m) \text{ kjer za velja } \gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_k > \gamma_{k+1} = \dots = \gamma_m. \quad (1)$$

– **DOPOLNI! Ali je samo diag za napisat ali celo razširjeno matriko?**

V kolikor matriko  $Z_1$  razdelimo na dve matriki:  $Z_{11} \in \mathbb{R}^{m \times k}$ , ki je sestavljena iz prvih  $k$  stolpcev matrike  $Z_1$  in  $Z_{12} \in \mathbb{R}^{m \times (m-k)}$ , ki je sestavljena iz preostalih  $m - k$  stolpcev matrike  $Z_1$ , lahko vidimo da velja:

$$Q^T K \begin{pmatrix} Z_{11} | Z_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_{11} | Z_{12} \end{pmatrix}.$$

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

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

Tako iz zgornje enačbe (1) dobimo:

$$\begin{pmatrix} K_A Z_{11} & K_A Z_{12} \\ K_B Z_{11} & K_B Z_{12} \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ DOPIŠI MEJE!}, \quad (2)$$

iz česar sledi:

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

in v kolikor še matriko  $Q$  razdelimo na podmatrike na naslednji način:

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

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

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

Iz tega neposredno sledi enakost:

$$K_A Z_{11} = Q_{11} D \implies K_A Z_{11} D^{-1} = Q_{11} =: K_{A_1},$$

kjer dodatno definiramo matriko  $A_1$  in enakost:

$$K_B Z_{11} = Q_{21} D \implies K_B Z_{11} D^{-1} = Q_{21} =: K_{B_1},$$

kjer dodatno definiramo matriko  $B_1$ .

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 dimzije  $k \times k$ . To enačbo lahko pokažemo tako, da razpišemo spodnjo enačbo:

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

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:

$$V^T K_{B_1} Z_2 = \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_p), \quad (3)$$

kjer je  $p = \min\{n, k\}$  in velja  $\beta_1 \geq \beta_2 \geq \dots \geq \beta_r > \beta_{r+1} = \dots = 0$ . Enačbo lahko tudi obrnemo in velja  $K_{B_1} = K_B Z_{11} D^{-1}$

Iz enačbe (2) sledi, da velja:

$$K_B Z_{12} = 0^{n \times k},$$

iz česar pa sledi, da je  $\beta_{p+1} = \dots = \beta_q = 0$ . Opazimo, da velja tudi:

$$\begin{aligned} V^T K_B Z \begin{pmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} V^T K_B Z_{11} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & V^T K_B Z_{12} I_{m-k} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_p) & 0 \\ 0 & \text{diag}(\beta_{p+1}, \dots, \beta_q) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Podobno bomo pokazali tudi za matriko  $K_A$ . Za  $G$  definirajmo matriko, ki jo dobimo s preoblikovanjem enačbe (??):

$$G := K_{B_1} Z_2 = V \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_p).$$

Opazimo, da so stolpci matrike  $A_1 Z_2$  medsebojno ortogonalni, ker velja:

$$\begin{aligned} (K_{A_1} Z_2)^T (K_{A_1} Z_2) &= Z_2^T K_{A_1}^T K_{A_1} Z_2 \\ &= Z_2^T (I_k - K_{B_1}^T K_{B_1}) Z_2 = Z_2^T Z_2 - Z_2^T K_{B_1}^T K_{B_1} Z_2 \\ &= I_k - G^T G = I_k - \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_p) V^T V \text{diag}(\beta_1, \dots, \beta_p) \\ &= \text{diag}(1 - \beta_1^2, \dots, 1 - \beta_p^2). \end{aligned}$$

Tako se v diagonalne vrednosti preslikajo dolžine posameznih stolpcev (skalarni produkti enakih stolpcev), vsi ostali skalarni produkti pa so enaki 0. Če za matriko  $A$  dodatno definiramo  $\alpha_i = 0$  za  $i = k + 1, \dots, n$  lahko vidimo, da iz  $K_{A_1} = K_A Z_{11} D^{-1}$  sledi:

$$U^T K_{A_1} Z_2 = U^T K_A Z_{11} D^{-1} Z_2 = \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_k).$$

Podobno, kot za matriko  $B$  tu lahko pokažemo:

$$\begin{aligned} &U^T K_A Z_1 \begin{pmatrix} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & I_{m-k} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} U^T K_A Z_{11} D^{-1} Z_2 & 0 \\ 0 & U^T K_A Z_{12} I_{m-k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) & 0 \\ 0 & \text{diag}(\alpha_{k+1}, \dots, \alpha_n) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

kjer smo pri prehodu v zadnjo vrstico ponovno uporabili enačbo (2). Sedaj definiramo matriko  $X$  na sledeči način:

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

– **NEJASNOST (oni tu vzamejo brez matrike  $Z_1$ )!** □

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 izrek (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  $K = \begin{pmatrix} K_A \\ K_B \end{pmatrix}$  in  $t = \text{rang}(K)$  obstajajo ortogonalne matrike  $U \in \mathbb{R}^{p \times p}$ ,  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $W \in \mathbb{R}^{t \times t}$  in  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ , da velja:*

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

kjer je

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

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

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

$0_A \in \mathbb{R}^{(p-r-s) \times (t-r-s)}$  in  $0_B \in \mathbb{R}^{(n-t+r) \times r}$  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.* Dovolj je, če ta izrek dokažemo za vsa kompleksna števila. Iz dejstva, da je množica realnih števil ( $\mathbb{R}$ ) podmnožica množice kompleksnih števil ( $\mathbb{C}$ ), sledi, da potem ta izrek velja tudi za vsa realna števila. Definirajmo matriko  $K$ , ki je sestavljena kot matrika sestavljena iz  $K_A$  in  $K_B$ , torej

$$K := \begin{pmatrix} K_A \\ K_B \end{pmatrix}.$$

Na zgoraj definirani matriki  $K$  lahko sedaj naredimo singularni razcep. Tako vemo, da za matriko  $K$  obstajata unitarni matriki  $P \in \mathbb{C}^{(m+p) \times (m+p)}$  in  $Q \in \mathbb{C}^{n \times n}$ , da velja

$$P^H K Q = \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

, kjer ima matrika  $R$  enak rang kot matrika  $K$ . Matriki  $Q$  in  $P$  sedaj ločimo na sledeče podmatrke:

$$Q = (Q_1, \quad Q_2) \quad \text{in} \quad P = (P_1, \quad P_2) = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix},$$

kjer je matrika  $Q_1 \in \mathbb{C}^{m \times t}$  sestavljena iz prvih  $k$  stolpcev matrike  $Q$ , matrika  $P_1 \in \mathbb{C}^{(p+n) \times t}$  pa iz prvih  $t$  stolpcev matrike  $P$  in njena podmatrika  $P_{11} \in \mathbb{C}^{p \times t}$  pa iz prvih  $m$  vrstic matrike  $P_1$ . Vemo, da ker je matrika  $P$  unitarna matrika, velja  $\|P\|_2 \leq 1$  in posledično velja še  $\|P_{11}\|_2 \leq \|P_1\|_2 \leq \|P\|_2 \leq 1$ . Iz izreka iz numeričnih metod velja, da posledično nobena lastna vrednost matrike  $P_{11}$  ni večja od 1.

Singularni razcep podobno kot na matriki  $K$  naredimo tudi na matriki  $P_{11}$ . Tako dobimo takšni matriki  $U \in \mathbb{C}^{p \times p}$  in  $W \in \mathbb{C}^{t \times t}$ , da velja

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

kjer je

$$\Sigma_A = \begin{pmatrix} 0_B & & \\ & D_B & \\ & & I_B \end{pmatrix},$$

kjer je matrika  $D_B$  diagonalna matrika z diagonalnimi vrednostmi  $\alpha_{r+1}, \dots, \alpha_{r+s}$ , za katere velja  $1 > \alpha_{r+1} \geq \dots \geq \alpha_{r+s} > 0$ .

(Spodnji del je vprašljiv? – **DOPOLNI!**)

Na matriki  $P_{21}$  uporabimo – **DOPOLNI!** razcep (s Householderjevimi zrcaljenji) in tako dobimo matriko  $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$ , da velja

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

kjer je matrika  $L_1$  spodnjetrokotna z diagonalnimi elementi večjimi od 0. Opazimo lahko, da velja spodnja enakost

$$\begin{pmatrix} U^T & 0 \\ 0 & V^T \end{pmatrix} \begin{bmatrix} P_{11} \\ P_{21} \end{bmatrix} W = \begin{bmatrix} U^H P_{11} W \\ V^H P_{21} W \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_A \\ L \end{pmatrix}.$$

Zgornja matrika  $\begin{pmatrix} \Sigma_A \\ L \end{pmatrix}$  je unitarna, saj je produkt unitarnih matrik. Posledično so njeni stolpci ortonormirani.  $\square$

Iz posplošenega singularnega razcepa, ki sta ga definirala Paige in Saunders neposredno sledi Van Loanova posplošitev singularnega razcepa. S preoblikovanjem enačbe (??) –**tu bi moralo pisati enačba 3**, dobimo:

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

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

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

Iz enačbe (??) tako tu očitno sledi:

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

Matriko  $X$  definiramo kot:

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

in dobimo ravno Van Loanovo posplošitev razcepa:

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



Podobno lahko pokažemo tudi za matriko  $K_B$ , za katero dobimo enačbo:

$$U^T K_B X = \begin{pmatrix} \Sigma_B & 0 \end{pmatrix}.$$

Tako je definirana matrika  $X$  ravno iskana matrika iz prve posplošitve singularnega razcepa in matriki  $\begin{pmatrix} \Sigma_A & 0 \end{pmatrix}$  in  $U^T K_B X = \begin{pmatrix} \Sigma_B & 0 \end{pmatrix}$  ravno iskani diagonalni matriki.

Za nadaljnje delo definirajmo matrike

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

$$H_B := [(c^{(1)} - c) e^{(1)T}, \dots, (c^{(k)} - c) e^{(k)T}]$$

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:

$$S_B = H_B H_B^T,$$

prav tako pa tudi matrika  $S_M$ :

$$S_M = H_M H_M^T.$$

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  $S_M$ . Ker je tu matrika  $S_2$  nesingularna in je sestavljena kot produkt matrike in transponirane te matrike je simetrično pozitivno definitna (poslidično 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:

$$S_2 = VV^T.$$

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

## 4 Algoritem

## 5 Zaključek

## 6 Viri