Autovectores algunos problemas de optimización Un problema frecuente en Machine Learning es el de optimizar $\overline{x}^T A\overline{x}$ donde $\overline{x}$ es unitario y $A_{d\times d}$ es simétrica. Ese tipo de problemas surgen en ejercicios de reducción de dimensionalidad e ingeniería de atributos.

$$\begin{aligned} \underset{\overline{x}}{\text{Optimize}} \quad & \overline{x}^T A\overline{x} \\ \text{sujeto a} \quad & \|\overline{x}\|^2 = 1 \end{aligned}$$

Sean $\overline{v}_1 \dots \overline{v}_d$ una base ortonormal de autovectores para la matriz simétrica $A_{d\times d}$, así que cualquier $\overline{x}$ puede expresarse como

$$\overline{x} = \sum_{i=1}^{d} \alpha_i \overline{v}_i$$

Reformulando el problema de optimización en términos de los parámetros α's, se tiene:

$$\begin{aligned} \underset{\alpha_1 \dots \alpha_d}{\text{Optimize}} \quad & \sum_{i=1}^{d} \lambda_i \alpha_i^2 \\ \text{sujeto a} \quad & \sum_{i=1}^{d} \alpha_i^2 = 1 \end{aligned}$$

El máximo es el mayor de los autovalores y se tiene al tomar el correspondiente α igual a 1 (los demás, cero). El mínimo es el menor de los autovalores y se tiene al tomar el correspondiente α igual a 1 (los demás, cero).

Al volver al problema original, el máximo es obtenido al tomar $\overline{x}$ como el autovector asociado al mayor autovalor. (Análoga síntesis se recupera para el problema de minimización).

El problema se puede generalizar.

$$\begin{aligned} \underset{\overline{x}_1 \dots \overline{x}_d}{\text{Optimize}} \quad & \sum_{i=1}^{k} \overline{x}_i^T A\overline{x}_i \\ \text{sujeto a} \quad & \|\overline{x}_i\|^2 = 1 \quad \forall i \in \{1 \dots k\} \\ & \overline{x}_1 \dots \overline{x}_k \text{ mutuamente ortogonales} \end{aligned}$$