

一、特徵值與特徵向量的幾何意義

1. 矩陣乘法：矩陣乘法對應一個變換，主要發生旋轉(方向)、伸縮(長度)的變化

矩陣對某些向量只伸縮，不旋轉，這些向量稱為這個矩陣的特徵向量，伸縮的比例就是特徵值

(1) 對稱矩陣：對 x, y 軸的一個拉伸變換 (2) 非對稱矩陣：在平面上對一個軸進行拉伸變換

2. 特徵值分解與特徵向量： $\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ ：向量 \mathbf{v} 是方陣 \mathbf{A} 的特徵向量， λ 為特徵向量 \mathbf{v} 對應的特徵值

$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{\Sigma}\mathbf{Q}^T$ ：特徵值分解， \mathbf{Q} ： \mathbf{A} 的特徵向量組成的矩陣， $\mathbf{\Sigma}$ ：對角矩陣，對角線元素為特徵值

特徵值由大到小排列，對應的特徵向量描述這個矩陣變化方向（從主要變化到次要變化）

前 N 個特徵向量，對應最主要 N 個變化方向，利用這前 N 個變化方向，近似(變換)矩陣

總結：特徵值：特徵有多重要；特徵向量：這個特徵是什麼；局限：變換的矩陣必須是方陣

二、奇異值分解

1. 奇異值：奇異值分解： $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$ ，適用於任意矩陣的一種分解方法

\mathbf{A} ： $M \times N$ 矩陣， $\mathbf{\Sigma}$ ： $M \times N$ 對角矩陣（對角線上元素為奇異值）

\mathbf{U} ： $M \times M$ 方陣（稱左奇異向量）， \mathbf{V}^T ： $N \times N$ 矩陣（稱右奇異向量）

2. 奇異值與特徵值：奇異值跟特徵值類似，在矩陣 $\mathbf{\Sigma}$ 中也是從大到小排列

$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{V} = \lambda\mathbf{V}$ ，對矩陣 \mathbf{A} 的轉置乘以 \mathbf{A} 求特徵值， \mathbf{V} ：上面的右奇異向量

$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ ， $u_i = \mathbf{A}^T\mathbf{v}_i / \sigma_i$ ， σ_i ：奇異值， u ：上面的左奇異向量

部分奇異值分解： $\mathbf{A} \approx \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$ ， \mathbf{U} ： (m,r) ， $\mathbf{\Sigma}$ ： (r,r) ， \mathbf{V}^T ： (r,n)

用前 r (r 遠小於 m, n) 個奇異值來近似矩陣， r 越接近於 n ，結果越接近於 \mathbf{A}

三、PCA 主成份分析(KL 變換)：(1) 圖像壓縮中的一種最優正交變換

(2) 統計特徵提取，構成子空間分析方法，模式識別的基礎

(3) 利用較少數量的特徵對樣本進行描述以達到降低特徵空間維數

1. PCA 理論：將 $N \times N$ 大小圖像，表示成一個 $N^2 \times 1$ 維向量，其中元素為像素點灰度

$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ ， $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iN^2}]^T$ ，(n 張圖平均值， i 張圖)

令 $N^2 \times n$ 矩陣 $\mathbf{X} = [x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \dots, x_n - \bar{x}]$ ，(矩陣減去平均值 = 將坐標移動到原點位置)

$\mathbf{Q} = \mathbf{X} * \mathbf{X}^T$ ，則 \mathbf{Q} 是一個 $N^2 * N^2$ 對稱方陣，又稱協方差矩陣

\mathbf{X} 中的每個元素 x_j 可以被表達： $x_j = \bar{x} + \sum_{i=1}^n g_{ij} e_i$

e_i 是 \mathbf{Q} 中非零特徵值對應的特徵向量，特徵向量 $e_1, e_2, e_3, \dots, e_n$ 組成特徵空間

對於 $N \times N$ 圖像， $e_1, e_2, e_3, \dots, e_n$ 是 $N^2 \times 1$ 維相互正交的向量。 g_{ij} 是 x_j 在空間中的坐標

2. 實現 PCA (求特徵值分解方法)：降維：選 \mathbf{Q} 中前 k 個特徵向量；對 $N \times N$ 的圖像， \mathbf{Q} 十分龐大， \mathbf{Q} 的大小為 $N^2 * N^2$

替代方案：考慮矩陣 $\mathbf{P} = \mathbf{X}^T * \mathbf{X}$ (\mathbf{Q} ： $N^2 * N^2$ ， \mathbf{P} ： $n * n$ ，通常 $n \ll N$)

$\mathbf{P} * \mathbf{e} = \lambda * \mathbf{e}$

$\mathbf{X}^T * \mathbf{X} * \mathbf{e} = \lambda * \mathbf{e}$

$\mathbf{X} * \mathbf{X}^T * \mathbf{X} * \mathbf{e} = \lambda * \mathbf{X} * \mathbf{e}$

$\mathbf{Q}(\mathbf{X} * \mathbf{e}) = \lambda(\mathbf{X} * \mathbf{e})$ ， \mathbf{e} ：矩陣 \mathbf{P} 的特徵向量， $\mathbf{X} * \mathbf{e}$ ：矩陣 \mathbf{Q} 的特徵向量

3. PCA 與奇異值分解 SVD (任何 $m \times n$ 矩陣)： \mathbf{Q} 奇異值分解， $\mathbf{Q} = \mathbf{U} * \mathbf{D} * \mathbf{V}^T$ ， \mathbf{Q} ， \mathbf{U} ， \mathbf{D} ， \mathbf{V} 大小皆為 $N^2 * N^2$

\mathbf{U} ： $\mathbf{Q} * \mathbf{Q}^T$ 的特徵向量， \mathbf{V} ： $\mathbf{Q}^T * \mathbf{Q}$ 的特徵向量，

\mathbf{D} 中奇異值的平方 = $\mathbf{Q} * \mathbf{Q}^T$ 和 $\mathbf{Q}^T * \mathbf{Q}$ 的特徵值

要從圖像庫中得到匹配的圖像必須對圖像數據的協方差矩陣進行降維，所以用到了 PCA (關鍵是特徵值及特徵向量的求取)

實現 PCA：(1) QR 算法：可以求實對稱矩陣的全部特徵值和特徵向量

(2) 雅可比算法：速度太慢

(3) SVD：和 PCA 是等價的

QR 算法：(1) 是一個迭代的過程

(2) 求解特徵值和向量之前，必須將實對稱矩陣轉化為三對角矩陣 (Householder 變換)

(3) 協方差矩陣是實對稱矩陣，因此不用轉化為 Hessen berg 矩陣

(4) 用變形 QR 算法計算實對稱三對角矩陣的全部特徵值與相應的特徵向量