主成份分析的 线性代数基础

线性代数基础

# 主成份分析的线性代数基础

王宁宁

广州医科大学

# 线性代数基础

主成份分析的

#### 线性代数基础

Cauchy-Schwar 不等式

矩阵的谱分解

广义 Cauchy-Schwarz

二次型极大化

单位球面上二次型极 大化

# Cauchy-Schwarz 不等式

主成份分析的 线性代数基础

#### **线性代数基础**

Cauchy-Schwai 不等式

广义 Cauchy-Schwarz 不等式

单位球面上二次型极

## Cauchy-Schwarz 不等式

设 b 和 d 是两个任意  $p \times 1$  向量,有:

$$(b'd) \leq (b'b)(d'd)$$

则当且仅当对某个常数 c 有 b = cd 时,等号成立。

#### 主成份分析的 线性代数基础

#### 线性代数基础

Cauchy-Schwai 不等式

广义 Cauchy-Schwarz

不等式

単位球面上二次型极

#### 证明

若b和d有一个为零,则结果显然成立。

$$0 \le (\mathbf{b} - x\mathbf{d})'(\mathbf{b} - x\mathbf{d})$$

$$= \mathbf{b}'\mathbf{b} - x\mathbf{d}'\mathbf{b} - \mathbf{b}'(x\mathbf{d}) + x^2\mathbf{d}'\mathbf{d}$$

$$= \mathbf{b}'\mathbf{b} - 2x\mathbf{b}'\mathbf{d} + x^2\mathbf{d}'\mathbf{d} \quad \left( \text{min} \frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}} \right)$$

$$= \mathbf{b}'\mathbf{b} - \frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}} + \frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}} - 2x\mathbf{b}'\mathbf{d} + x^2\mathbf{d}'\mathbf{d}$$

$$= \mathbf{b}'\mathbf{b} - \frac{(\mathbf{b}'\mathbf{d})^2}{\mathbf{d}'\mathbf{d}} + (\mathbf{d}'\mathbf{d}) \left( x - \frac{\mathbf{b}'\mathbf{d}}{\mathbf{d}'\mathbf{d}} \right)^2$$

取  $x = \frac{b'd}{d'd}$  得证。等号显然当对某个常数 c 有 b = cd 时成立

# 矩阵的谱分解

主成份分析的 线性代数基础

线性代数基础

矩阵的谱分解

/ へ Cauchy-Schwar 不等式

单位球面上二次型极 大化

### 矩阵的谱分解

设  $B_{p \times p}$  是任意一个正定矩阵,有:

$$\boldsymbol{B} = \lambda_1 \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1' + \lambda_2 \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2' + \dots + \lambda_p \boldsymbol{e}_p \boldsymbol{e}_p'$$

其中  $\lambda_i$ ,  $e_i$ , 是 B 的第 i 个特征根及相应的特征向量。

# 矩阵的谱分解

主成份分析的 线性代数基础

线性代数基础

矩阵的谱分解

### 矩阵的谱分解

设  $B_{p \times p}$  是任意一个正定矩阵,有:

$$\boldsymbol{B} = \lambda_1 \boldsymbol{e}_1 \boldsymbol{e}_1' + \lambda_2 \boldsymbol{e}_2 \boldsymbol{e}_2' + \dots + \lambda_p \boldsymbol{e}_p \boldsymbol{e}_p'$$

其中  $\lambda_i$ ,  $e_i$ , 是 B 的第 i 个特征根及相应的特征向量。

#### 推论

$$egin{aligned} m{B}^{rac{1}{2}} &= \sqrt{\lambda_1} m{e_1} m{e_1}' + \sqrt{\lambda_2} m{e_2} m{e_2}' + \cdots + \sqrt{\lambda_p} m{e_p} m{e_p}' \ m{B}^{-rac{1}{2}} &= rac{1}{\sqrt{\lambda_1}} m{e_1} m{e_1}' + rac{1}{\sqrt{\lambda_2}} m{e_2} m{e_2}' + \cdots + rac{1}{\sqrt{\lambda_p}} m{e_p} m{e_p}' \end{aligned}$$

# 广义 Cauchy-Schwarz 不等式

主成份分析的 线性代数基础

<mark>线性代数基础</mark> Cauchy-Schwarz <sup>不等式</sup>

广义 Cauchy-Schwarz 不等式

单位球面上二次型极

### 广义 Cauchy-Schwarz 不等式

设 b 和 d 是两个任意  $p \times 1$  向量, $B_{p \times p}$  是正定矩阵,有:

$$(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{d}) \leq (\boldsymbol{b}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{b})(\boldsymbol{d}'\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d})$$

则当且仅当对某个常数 c 有  $b = cB^{-1}d$  时,等号成立。

# 广义 Cauchy-Schwarz 不等式

主成份分析的 线性代数基础

线性代数基础 Cauchy-Schwar: <sup>不等式</sup>

厂义 Cauchy-Schwarz 不等式

### 广义 Cauchy-Schwarz 不等式

设 b 和 d 是两个任意  $p \times 1$  向量, $B_{p \times p}$  是正定矩阵,有:

$$(\boldsymbol{b}'\boldsymbol{d}) \leq (\boldsymbol{b}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{b})(\boldsymbol{d}'\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d})$$

则当且仅当对某个常数 c 有  $\boldsymbol{b} = c\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d}$  时,等号成立。

### 证明

只需注意到:

$$b'd = b'Id = b'B^{\frac{1}{2}}B^{-\frac{1}{2}}d = (B^{\frac{1}{2}}b)'(B^{-\frac{1}{2}}d)$$

用  $B^{\frac{1}{2}}b, B^{-\frac{1}{2}}d$  替换 b, d 利用 Cauchy-Schwarz 不等式即得。

## 二次型极大化

#### 二次型极大化

设  $B_{p\times p}$  是任意一个正定矩阵, $d_{p\times 1}$  是任意给定的向量,对 任意  $x_{p\times 1}$  有:

$$\max \frac{(x'd)^2}{x'Bx} \le b'B^{-1}d$$

则当且仅当对某个常数 c 有  $\mathbf{x} = c\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d}$  时,等号成立。

## 二次型极大化

主成份分析的 线性代数基础

#### 二次型极大化

设  $B_{p\times p}$  是任意一个正定矩阵, $d_{p\times 1}$  是任意给定的向量,对任意  $x_{p\times 1}$  有:

$$\max \frac{(\boldsymbol{x}'\boldsymbol{d})^2}{\boldsymbol{x}'\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} \leq \boldsymbol{b}'\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d}$$

则当且仅当对某个常数 c 有  $\boldsymbol{x} = c\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{d}$  时,等号成立。

#### 证明

利用广义 Cauchy-Schwarz 不等式有:

$$(\mathbf{x}'\mathbf{d})^2 \le (\mathbf{x}'\mathbf{B}\mathbf{x})(\mathbf{b}'\mathbf{B}^{-1}\mathbf{d})$$

利用 x'Bx 除以上式两边即得结论,而且当  $x = cB^{-1}d$  时,达到上界。

## 单位球面上二次型极大化

主成份分析的 线性代数基础

### 单位球面上二次型极大化

设  $B_{p \times p}$  是任意一个正定矩阵,其特征值为

 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$ ,相应的特征向量为  $e_1, e_2, \cdots, e_p$ ,对任意单位向量  $x_{p\times 1}$  有:

$$\max_{m{x} 
eq 0} rac{m{x}' m{B} m{x}}{m{x}' m{x}} = \lambda_1$$
 当  $m{x} = m{e}_1$  时达到  $\min_{m{x} 
eq 0} rac{m{x}' m{B} m{x}}{m{x}' m{x}} = \lambda_p$  当  $m{x} = m{e}_p$  时达到

特别的:

$$\max_{m{x}\perp e_1,\cdots,e_k}rac{m{x}'m{B}m{x}}{m{x}'m{x}}=\lambda_{k+1}$$
 当  $m{x}=m{e}_{k+1}$  时达到

半位球曲上二次型极 大化

#### 证明

只证第一式: 设  $B^{\frac{1}{2}} = P \Lambda P', y = P'x$ , 其中 P 是正交阵

$$\max_{\boldsymbol{x} \neq 0} \frac{\boldsymbol{x}' \boldsymbol{B} \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}' \boldsymbol{x}} = \frac{\boldsymbol{x}' \boldsymbol{B}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{B}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}' \boldsymbol{P} \boldsymbol{P}' \boldsymbol{x}} = \frac{\boldsymbol{x}' \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{P}' \boldsymbol{P} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{P}' \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{y}' \boldsymbol{y}}$$
$$= \frac{\boldsymbol{y}' \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}' \boldsymbol{y}} = \frac{\sum_{i=1}^{p} \lambda_{i} y_{i}^{2}}{\sum_{i=1}^{p} y_{i}^{2}} \leq \lambda_{1} \frac{\sum_{i=1}^{p} y_{i}^{2}}{\sum_{i=1}^{p} y_{i}^{2}} = \lambda_{1}$$

当  $x = e_1$  时:

$$\frac{e_1'Be_1}{e_1'e_1} = e_1'Be_1 = \lambda_1$$

不等式

单位球面上二次型极