

Teorema di Decomposizione Spettrale

Analisi Esplorativa

Aldo Solari



- ① Decomposizione Spettrale
- ② Matrice dei dati ortogonalizzati
- ③ Decomposizione in Valori Singolari
- ④ Appendice



Outline

- ① Decomposizione Spettrale
- ② Matrice dei dati ortogonalizzati
- ③ Decomposizione in Valori Singolari
- ④ Appendice



Direzione e lunghezza di un vettore

Sia $\underset{k \times 1}{a}$ un vettore a valori reali. Allora $\underset{k \times 1}{a}$ si può decomporre in due componenti,

- Lunghezza

$$\lambda = \left\| \underset{k \times 1}{a} \right\| = \sqrt{\underset{1 \times k}{a'} \underset{k \times 1}{a}} = \sqrt{\sum_{j=1}^k a_j^2}$$

- Direzione *normalizzata*

$$\underset{k \times 1}{v} = \frac{\underset{k \times 1}{a}}{\lambda}$$

con $\left\| \underset{k \times 1}{v} \right\| = 1$



Autovalori e autovettori

- Questa idea si può estendere ad una matrice simmetrica A a valori reali, che è un insieme di vettori
- Gli autovalori (*eigenvalues*) λ e gli autovettori (*eigenvectors*) normalizzati v con $\|v\| = 1$ sono definiti dall'equazione

$$A v = \lambda v$$

$k \times k$ $k \times 1$ $k \times 1$ $k \times 1$

- Ci sono esattamente k coppie (λ_j, v_j) , $j = 1, \dots, k$ che soddisfano l'equazione
- Per convenzione, gli autovalori sono ordinati in maniera decrescente:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k$$



Autovalori e autovettori

- A una matrice simmetrica a valori reali
 $k \times k$
- A definita positiva \Leftrightarrow tutti gli autovalori di A sono positivi, i.e.
 $k \times k$
 $\lambda_j > 0, j = 1, \dots, k$
- A semidefinita positiva \Leftrightarrow tutti gli autovalori di A sono non
 $k \times k$
negativi, i.e. $\lambda_j \geq 0, j = 1, \dots, k$
- A con $\text{rango}(A) = r \leq k$. Allora A ha r autovalori non nulli,
 $k \times k$ $k \times k$
e i rimanenti $k - r$ autovalori nulli
- Autovettori normalizzati v_j e v_l associati ad autovalori distinti
 $k \times 1$ $k \times 1$
 $\lambda_j \neq \lambda_l$ sono perpendicolari, i.e. $v_j' v_l = 0$
 $1 \times k$ $k \times 1$



Teorema di Decomposizione Spettrale

Sia A una matrice simmetrica a valori reali. Allora A si può esprimere come

$$A = V \Lambda V' = \sum_{j=1}^k \lambda_j v_j v_j'$$

dove

- $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$ è una matrice diagonale dove il j -simo elemento diagonale λ_j è il j -simo autovalore associato ad A
- $V = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_k \\ k \times 1 & & k \times 1 \end{bmatrix}$, dove la j -sima colonna v_j è il j -simo autovettore normalizzato ($\|v_j\| = 1$) associato all'autovalore λ_j
- V è una matrice ortogonale: $V V' = V' V = I$



Esempio

$A_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} 2.2 & 0.4 \\ 0.4 & 2.8 \end{bmatrix}$ simmetrica e a valori reali. Otteniamo gli autovalori

$\lambda_1 = 3$ e $\lambda_2 = 2$, a cui corrispondono gli autovalori (normalizzati)

$v_1_{2 \times 1} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix}$ e $v_2_{2 \times 1} = \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} \\ -1/\sqrt{5} \end{bmatrix}$, quindi

$$A_{2 \times 2} = 3 \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} \\ -1/\sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$



Lemma

$$\boxed{\begin{matrix} A^q = V \Lambda^q V' \\ k \times k \quad k \times k \quad k \times k \quad k \times k \end{matrix}}$$

dove $\Lambda^q = \text{diag}(\lambda_1^q, \dots, \lambda_k^q)$
 $k \times k$

- Se A è semidefinita positiva, vale solo per $q > 0$ razionali, ovvero per $q \in \mathbb{Q}^+$
- Se A è definita positiva, vale anche per $q < 0$ razionali, ovvero per $q \in \mathbb{Q} \setminus \{0\}$



Applicazioni del Lemma

- $A^{-1} = \underset{k \times k}{V} \underset{k \times k}{\Lambda^{-1}} \underset{k \times k}{V'}$
- $A^{-\frac{1}{2}} = \underset{k \times k}{V} \underset{k \times k}{\Lambda^{-\frac{1}{2}}} \underset{k \times k}{V'}$
- $A^2 = \underset{k \times k}{V} \underset{k \times k}{\Lambda^2} \underset{k \times k}{V'}$
- $A^{\frac{1}{2}} = \underset{k \times k}{V} \underset{k \times k}{\Lambda^{\frac{1}{2}}} \underset{k \times k}{V'}$



Decomposizione Spettrale di S

La decomposizione spettrale della matrice simmetrica $S_{p \times p}$ è

$$S_{p \times p} = V_{p \times p} \Lambda_{p \times p} V'_{p \times p}$$

Ricordando che $V_{p \times p} V'_{p \times p} = V'_{p \times p} V_{p \times p} = I_{p \times p}$, otteniamo

$$\operatorname{tr}(S_{p \times p}) = \operatorname{tr}(V_{p \times p} \Lambda_{p \times p} V'_{p \times p}) = \operatorname{tr}(\Lambda_{p \times p} V'_{p \times p} V_{p \times p}) = \operatorname{tr}(\Lambda_{p \times p}) = \sum_{j=1}^p \lambda_j$$

$$\begin{aligned} \det(S_{p \times p}) &= \det(V_{p \times p} \Lambda_{p \times p} V'_{p \times p}) = \det(V_{p \times p}) \det(\Lambda_{p \times p}) \det(V'_{p \times p}) \\ &= \det(\Lambda_{p \times p}) \det(V_{p \times p} V'_{p \times p}) = \det(\Lambda_{p \times p}) \det(I_{p \times p}) = \prod_{j=1}^p \lambda_j \end{aligned}$$

Per le proprietà di traccia e determinante, vedi Appendice della lezione su varianza totale e generalizzata;



Outline

- ① Decomposizione Spettrale
- ② Matrice dei dati ortogonalizzati**
- ③ Decomposizione in Valori Singolari
- ④ Appendice



Matrice dei dati ortogonalizzati \tilde{Z}

Sia S , la matrice di varianze/covarianze di X , definita positiva.

Possiamo allora ottenere la matrice dei dati ortogonalizzati

$$\tilde{Z} = H X S^{-\frac{1}{2}}$$

tale per cui

- \tilde{Z} ha vettore delle medie nullo 0
- \tilde{Z} ha matrice di varianze/covarianze $S^{\tilde{Z}} = I$

Questa trasformazione lineare dei dati originali X si chiama *trasformazione di Mahalanobis*



Dati ortogonalizzati \tilde{Z}

Dimostrazione:

Il vettore delle medie di \tilde{Z} è

$$\frac{1}{n} \tilde{Z}' \mathbf{1}_{n \times 1} = \frac{1}{n} (S^{-\frac{1}{2}})' \tilde{X}' \mathbf{1}_{n \times 1} = S^{-\frac{1}{2}} \mathbf{0}_{p \times 1} = \mathbf{0}_{p \times 1}$$

ricordando che

- il vettore delle medie di \tilde{X} è nullo: $\frac{1}{n} \tilde{X}' \mathbf{1}_{n \times 1} = \mathbf{0}_{p \times 1}$
- la decomposizione spettrale di S è $S = V \Lambda V'$
- per il Lemma, abbiamo $S^{-\frac{1}{2}} = V \Lambda^{-\frac{1}{2}} V'$ simmetrica:

$$(S^{-\frac{1}{2}})' = (V \Lambda^{-\frac{1}{2}} V')' = V \Lambda^{-\frac{1}{2}} V' = S^{-\frac{1}{2}}$$



Dati ortogonalizzati \tilde{Z}

Dimostrazione:

La matrice di varianze/covarianze di \tilde{Z} è

$$\begin{aligned} S^{\tilde{Z}} &= \frac{1}{n} \tilde{Z}' H \tilde{Z} = \frac{1}{n} (S^{-\frac{1}{2}})' \tilde{X}' \tilde{X} S^{-\frac{1}{2}} = S^{-\frac{1}{2}} S S^{-\frac{1}{2}} \\ &= (V \Lambda^{-\frac{1}{2}} V') (V \Lambda V') (V \Lambda^{-\frac{1}{2}} V') = V \Lambda^{-\frac{1}{2}} \Lambda \Lambda^{-\frac{1}{2}} V' \\ &= V \Lambda \Lambda^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{1}{2}} V' = V \Lambda \Lambda^{-1} V' = V I V' = I \end{aligned}$$

ricordando che

- V è una matrice ortogonale: $V V' = V' V = I$
- $\text{diag}(a_1, \dots, a_q) \text{diag}(b_1, \dots, b_q) = \text{diag}(a_1 b_1, \dots, a_q b_q) = \text{diag}(b_1, \dots, b_q) \text{diag}(a_1, \dots, a_q)$

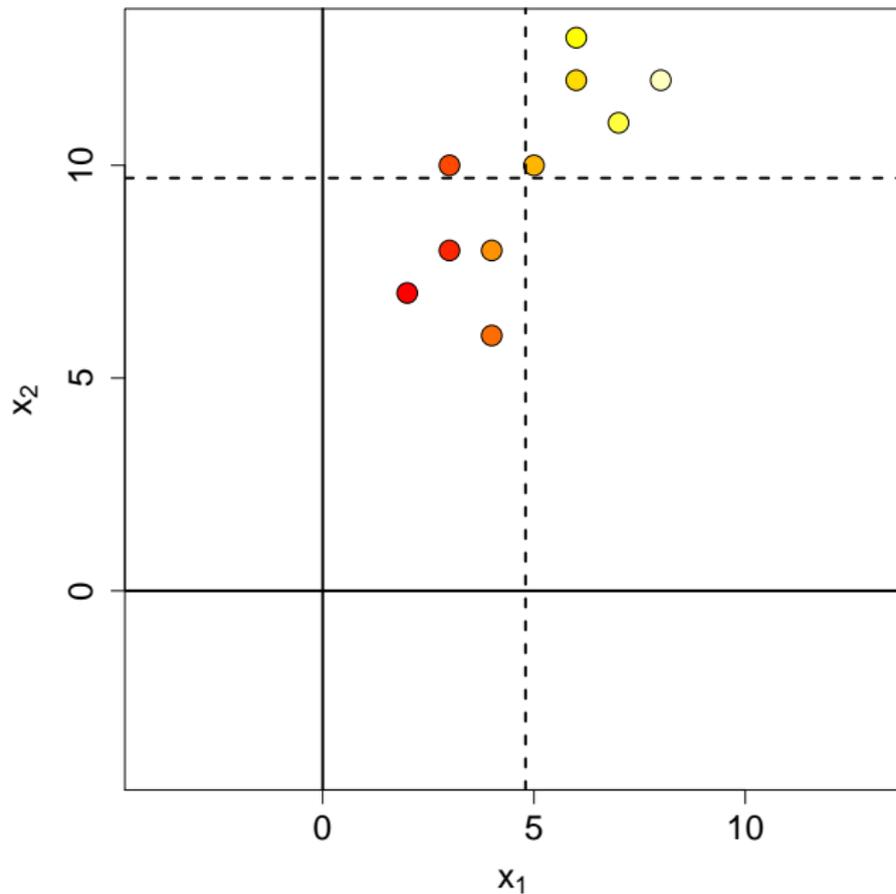


Dati ortogonalizzati \tilde{Z}

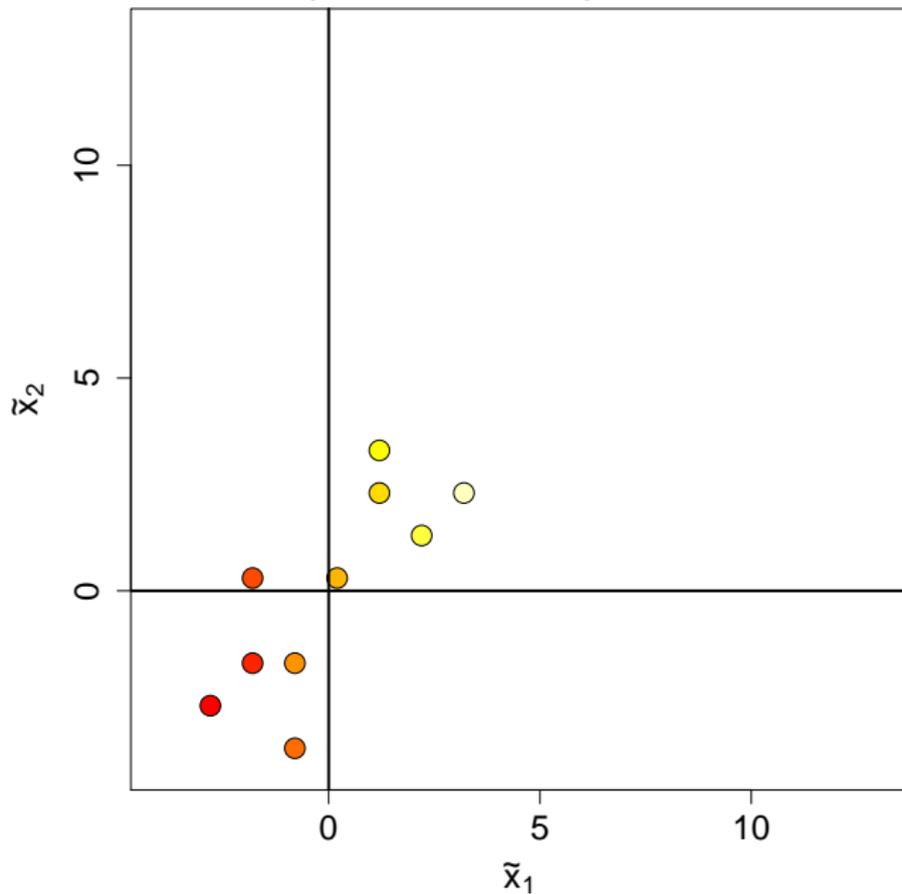
Matrice dei dati	Vettore delle medie	Matrice di varianze/covarianze	Matrice di correlazione
X $n \times p$	\bar{x} $p \times 1$	S $p \times p$	R $p \times p$
\tilde{X} $n \times p$	0 $p \times 1$	$S^{\tilde{X}} = S$ $p \times p$	$R^{\tilde{X}} = R$ $p \times p$
Z $n \times p$	0 $p \times 1$	$S^Z = R$ $p \times p$	$R^Z = R$ $p \times p$
\tilde{Z} $n \times p$	0 $p \times 1$	$S^{\tilde{Z}} = I$ $p \times p$	$R^{\tilde{Z}} = I$ $p \times p$



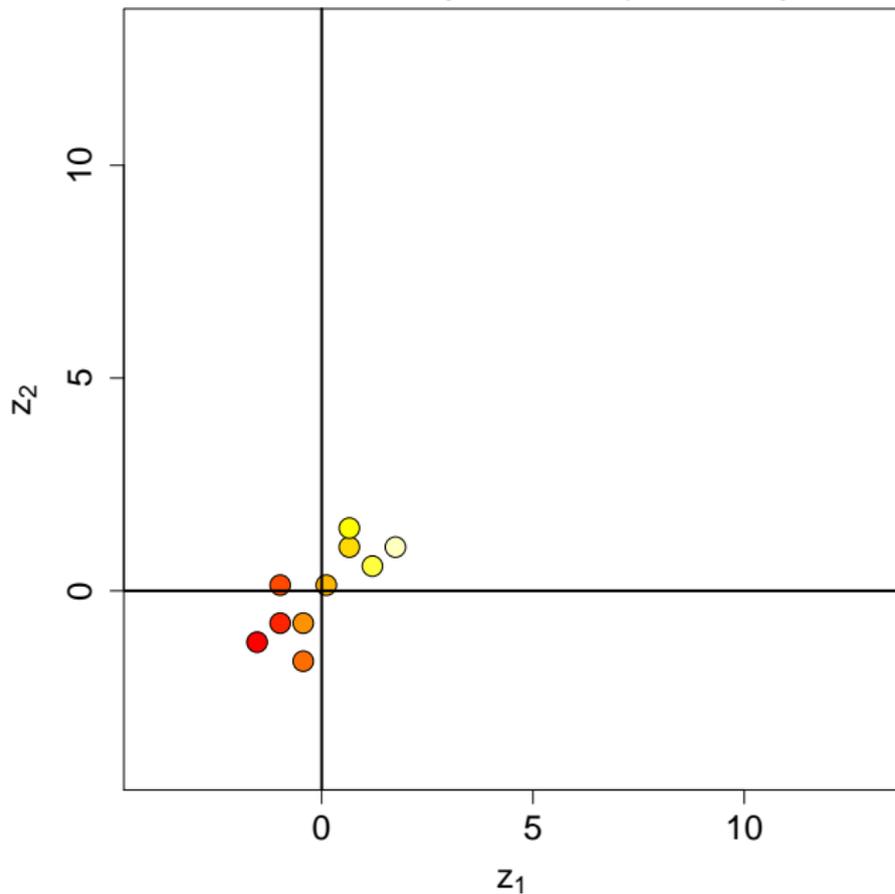
Matrice originale X



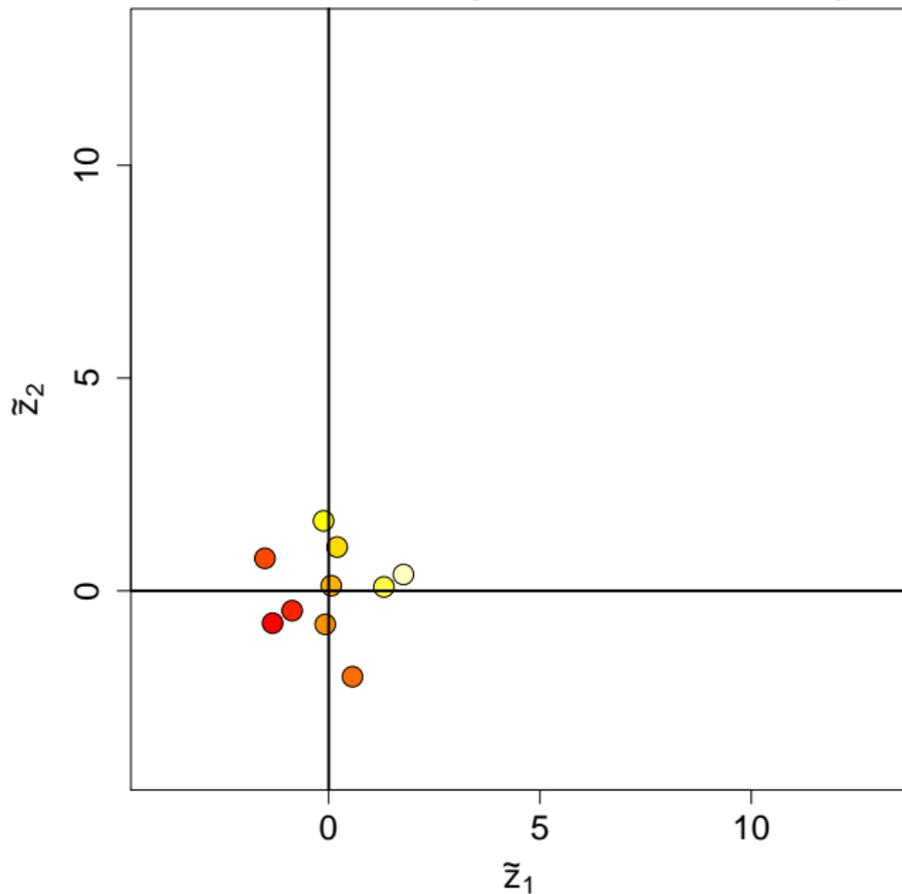
Matrice centrata \tilde{X} (traslazione)



Matrice standardizzata Z (compr./dilat.)



Matrice ortogonalizzata \tilde{Z} (decorrelazione)



Outline

- ① Decomposizione Spettrale
- ② Matrice dei dati ortogonalizzati
- ③ Decomposizione in Valori Singolari**
- ④ Appendice



Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

- Si possono generalizzare le idee della Decomposizione Spettrale per ottenere la Decomposizione in Valori Singolari (*Singular Value Decomposition*) di una matrice rettangolare A , dove:
$$A \begin{matrix} m \times k \end{matrix}$$
- i vettori v_j e u_j della SVD di A sono gli autovettori
$$\begin{matrix} k \times 1 & m \times 1 & m \times k \end{matrix}$$

normalizzati delle matrici simmetriche $K = A' A$ e
$$\begin{matrix} k \times k & k \times m & m \times k \end{matrix}$$

 $M = A A'$, rispettivamente
$$\begin{matrix} m \times m & m \times k & k \times m \end{matrix}$$
- i valori δ_j della SVD di A sono la radice quadrata degli autovalori
$$\begin{matrix} m \times k \end{matrix}$$

 > 0 della matrice K (o, equivalentemente, della matrice M)



Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

Sia $A_{m \times k}$ una matrice rettangolare a valori reali. Allora esiste una matrice ortogonale $U_{m \times m}$ e una matrice ortogonale $V_{k \times k}$ tali che

$$A_{m \times k} = U_{m \times m} \Delta_{m \times k} V'_{k \times k} = \sum_{j=1}^{\min(m,k)} \delta_j u_j v'_j$$

$m \times k$ $m \times m$ $m \times k$ $k \times k$ $m \times 1$ $1 \times k$

dove la matrice $\Delta_{m \times k}$ ha elemento di posizione (j, j) pari a $\delta_j \geq 0$ per $j = 1, \dots, \min(m, k)$ e gli altri elementi pari a 0.

Le costanti $\delta_1 \geq \dots \geq \delta_{\min(m,k)}$ sono dette *valori singolari* di $A_{m \times k}$.



Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

- Sia A con $\text{rango}(A) = r \leq \min(m, k)$.
- Le k colonne di V sono gli autovettori di $K = A' A$

$$\begin{aligned}
 A' A &= V \Delta' U' U \Delta V' = V \Delta' \Delta V' \\
 &= V \begin{bmatrix} \Delta_r^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V' = V^K \Lambda^K (V^K)'
 \end{aligned}$$

- Le m colonne di U sono gli autovettori di $M = A A'$

$$\begin{aligned}
 A A' &= U \Delta V' V \Delta' U' = U \Delta \Delta' U' \\
 &= U \begin{bmatrix} \Delta_r^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U' = U^M \Lambda^M (U^M)'
 \end{aligned}$$



Decomposizione in Valori Singolari (SVD)

- Sia A con $\text{rango}(A) = r \leq \min(m, k)$.
- $\Delta_r^2 = \text{diag}(\delta_1^2, \dots, \delta_r^2)$ i cui elementi diagonali sono gli r autovalori non nulli $\lambda_1^K \geq \lambda_2^K \geq \dots \geq \lambda_r^K > 0$ di $K = A' A$ (o di $M = A A'$)

Possiamo scrivere

$$A = U \Delta V' = U_r \Delta_r V_r' = \sum_{j=1}^r \delta_j u_j v_j'$$

con

- $U_r = \begin{bmatrix} u_1 & \dots & u_r \\ m \times 1 & & m \times 1 \end{bmatrix}$
- $V_r = \begin{bmatrix} v_1 & \dots & v_r \\ k \times 1 & & k \times 1 \end{bmatrix}$
- $\Delta_r = \text{diag}(\delta_1, \dots, \delta_r)$ con $\delta_j > 0$



Matrice di varianze/covarianze S

- Decomposizione spettrale di $S_{p \times p}$

$$S_{p \times p} = V_{p \times p} \Lambda_{p \times p} V'_{p \times p}$$

- Decomposizione in valori singolari di $\tilde{X}_{n \times p}$

$$\tilde{X}_{n \times p} = U_{n \times n} \Delta_{n \times p} V'_{p \times p}$$

- Decomposizione in valori singolari di $S_{p \times p}$

$$S = \frac{1}{n} \tilde{X}' \tilde{X} = \frac{1}{n} V \Delta U' U \Delta V' = V \frac{1}{n} \Delta^2 V'$$



Outline

- ① Decomposizione Spettrale
- ② Matrice dei dati ortogonalizzati
- ③ Decomposizione in Valori Singolari
- ④ Appendice



Autovalori e autovettori

Per ogni matrice quadrata $A_{k \times k}$, si possono trovare uno scalare λ e un vettore $v_{k \times 1}$ tali che

$$A_{k \times k} v_{k \times 1} = \lambda v_{k \times 1} \quad (1)$$

λ è detto autovalore (*eigenvalue*) di $A_{k \times k}$ e $v_{k \times 1}$ è l'autovettore (*eigenvector*) di $A_{k \times k}$ corrispondente a λ . Per risolvere l'equazione (1) scriviamo:

$$(A_{k \times k} - \lambda I_{k \times k}) v_{k \times 1} = 0_{k \times 1} \quad (2)$$



Autovalori e autovettori

- Se $\det \begin{pmatrix} A & -\lambda I \\ k \times k & k \times k \end{pmatrix} \neq 0$, $\begin{pmatrix} A & -\lambda I \\ k \times k & k \times k \end{pmatrix}$ è invertibile e $v = 0$ è l'unica soluzione. Per escludere le soluzioni banali, imponiamo quindi $\det \begin{pmatrix} A & -\lambda I \\ k \times k & k \times k \end{pmatrix} = 0$ in modo tale da ottenere valori di λ che possano essere sostituiti in (1) e (2) per ottenere i corrispondenti valori di v .
- Quindi, affinché (2) abbia una soluzione, è necessario che le colonne di $\begin{pmatrix} A & -\lambda I \\ k \times k & k \times k \end{pmatrix}$ siano linearmente dipendenti. Concludendo, $\begin{pmatrix} A & -\lambda I \\ k \times k & k \times k \end{pmatrix}$ deve essere singolare (determinate pari a 0) affinché esista un $v \neq 0$ che sia soluzione di (1).
- L'equazione $\det \begin{pmatrix} A & -\lambda I \\ k \times k & k \times k \end{pmatrix}$ è detta equazione caratteristica. Visto che $\begin{pmatrix} A \\ k \times k \end{pmatrix}$ ha dimensioni $k \times k$, l'equazione caratteristica ha k radici; cioè, $\begin{pmatrix} A \\ k \times k \end{pmatrix}$ ha k autovalori $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$. I valori λ_j non sono tutti necessariamente distinti da zero.



Autovalori e autovettori

- Però, se A è non singolare, gli autovalori saranno tutti diversi tra loro. Gli autovettori v_1, v_2, \dots, v_k associati a $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ sono definiti da (2).
- Notiamo che se moltiplichiamo entrambi i membri della (1) per uno scalare c (e sfruttiamo la proprietà commutativa), otteniamo

$$(A - \lambda I) c v = c 0 = 0.$$

Quindi, se v è un autovettore di A , anche $c v$ è un autovettore. In generale, ogni autovettore è unico a meno di valori scalari $c \neq 0$. Si noti in ogni caso che la direzione indicata dal vettore v è unica (la moltiplicazione per c mantiene costanti i rapporti delle coordinate) e quindi la soluzione è essenzialmente unica.

- Per questo motivo è uso definire l'autovettore normalizzato

$$e = v / \|v\| \text{ di lunghezza unitaria, cioè tale che } e^T e = 1.$$



Autovalori e autovettori: esempio

- Facciamo un esempio, troviamo gli autovalori e autovettori della matrice

$$A_{2 \times 2} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{bmatrix}$$

- L'equazione caratteristica è

$$\det(A_{2 \times 2} - \lambda I_{2 \times 2}) = \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 2 \\ -1 & 4 - \lambda \end{pmatrix} = (1 - \lambda)(4 - \lambda) + 2 = 0$$
$$\lambda^2 - 5\lambda + 6 = (\lambda - 3)(\lambda - 2) = 0,$$

da cui si ricavano $\lambda_1 = 3$ e $\lambda_2 = 2$.



Autovalori e autovettori: esempio

- Per trovare l'autovettore e_1 corrispondente a $\lambda_1 = 3$, usiamo la (2):

$$\begin{aligned} & \left(\begin{matrix} A & -\lambda I \\ 2 \times 2 & 2 \times 2 \end{matrix} \right) \begin{matrix} e_1 \\ 2 \times 1 \end{matrix} = \begin{matrix} 0 \\ 2 \times 1 \end{matrix} \\ & \begin{bmatrix} 1-3 & 2 \\ -1 & 4-3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & \begin{cases} -2e_{11} + 2e_{21} = 0 \\ -e_{11} + e_{21} = 0. \end{cases} \end{aligned}$$



Autovalori e autovettori: esempio

- Come atteso, la seconda equazione è ridondante in presenza della prima (e viceversa), rimane quindi una sola equazione con due parametri: $e_{11} = e_{21}$. Ora se all'unica equazione aggiungiamo la condizione di vettore di lunghezza unitaria ($\| e_1 \|_{2 \times 1} = 1$ cioè

$\sqrt{e_{11}^2 + e_{21}^2} = 1$) otteniamo

$$e_1 = \begin{bmatrix} e_{11} \\ e_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

- In modo analogo, in corrispondenza di $\lambda_2 = 2$, si ha

$$e_2 = \begin{bmatrix} 2/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} \end{bmatrix}.$$



Autovalori e autovettori: ulteriori risultati

- Nonostante gli autovalori di una matrice $A_{k \times k}$ non siano necessariamente tutti reali, ciò è garantito nel caso $A_{k \times k}$ sia simmetrica e reale.
- Sia $A_{k \times k}$ una matrice $k \times k$ and $B_{k \times k}$ una matrice $k \times k$ con $\text{rango}(B) = k$. $A_{k \times k}$ e $B^{-1} A B_{k \times k}$ hanno gli stessi autovalori.
- una matrice $A_{k \times k}$ con $\text{rango}(A) < k$ ha almeno un autovalore pari a zero.
- una matrice idempotente ha solo autovalori pari a 1 o 0.
- - Se $A_{k \times k}$ è semidefinita positiva, allora $\lambda_j \geq 0, j = 1, \dots, k$;
- Se $A_{k \times k}$ è definita positiva, allora $\lambda_j > 0, j = 1, \dots, k$
- Autovettori associati a distinti autovalori sono perpendicolari (se $\lambda_j \neq \lambda_l, e'_j e_l = 0$)
 $1 \times k$ $k \times 1$

