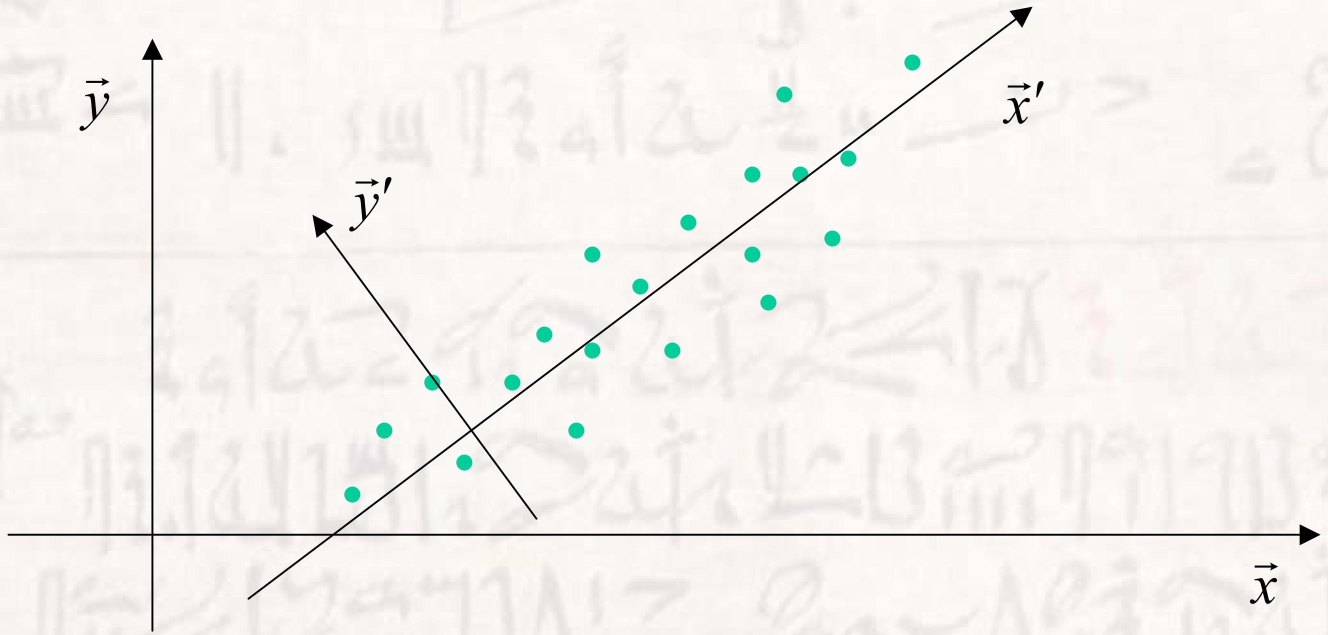
Principal Component Analysis (Analýza hlavních komponent)

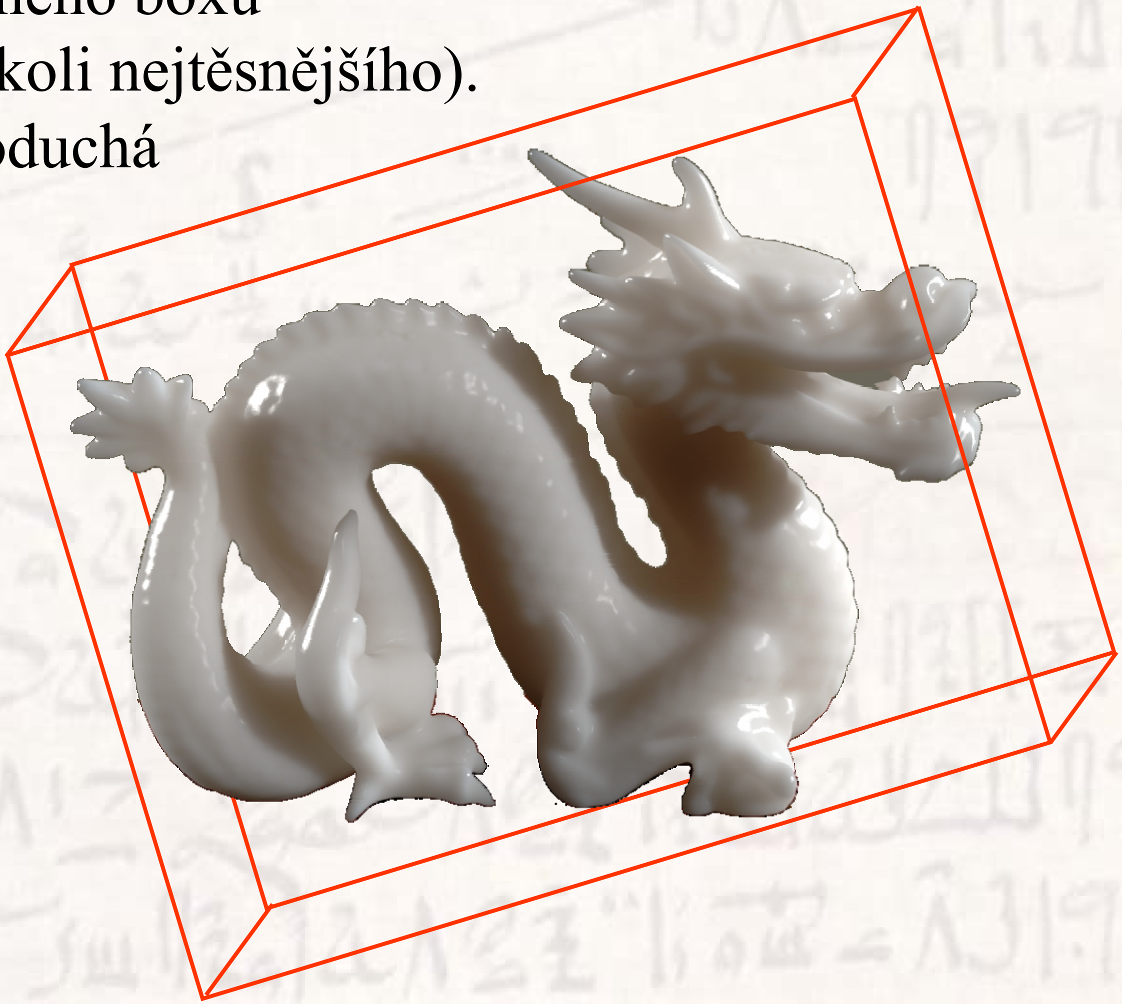
Hlavní myšlenka: PCA nalezne ortogonální bázi, která nelépe reprezentuje danou datovou množinu.



Je minimalizována suma (vzdáleností)^2 od osy $\vec{x}'$

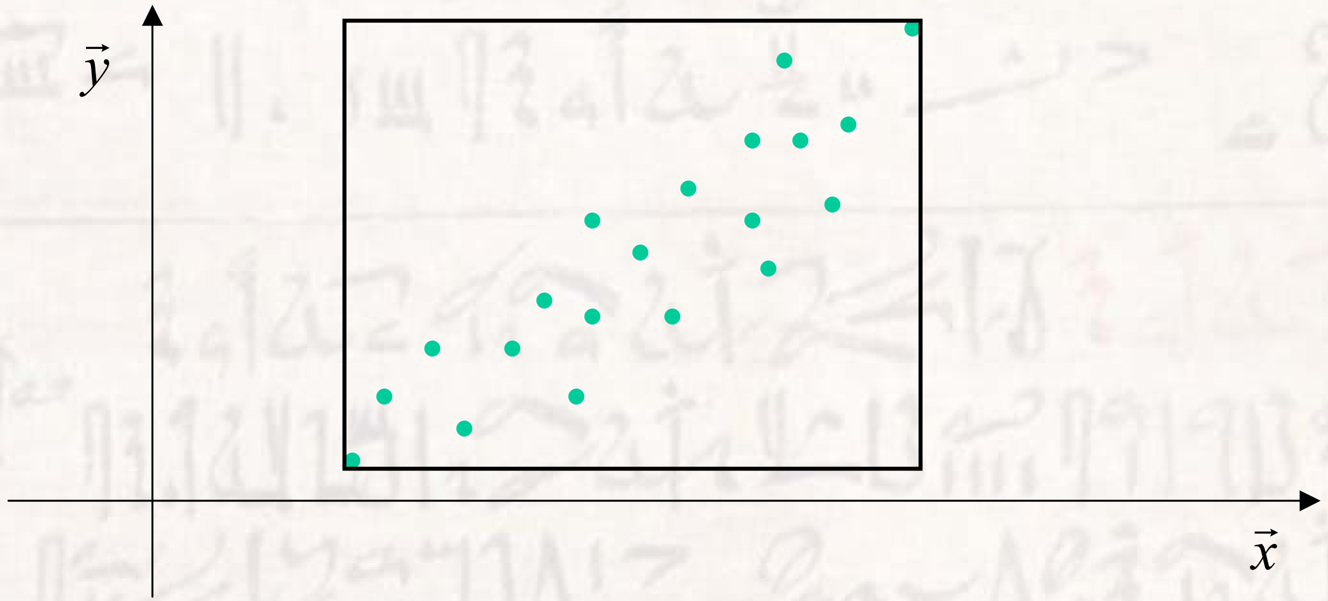
PCA

- Aplikace – nalezení těsného boxu obklopujícího body (nikoli nejtěsnějšího).
- Slouží jako velmi jednoduchá aproximace objektu
- Rychlá detekce kolizí
  - OBB algoritmus
- Řešení viditelnosti
- Aproximace velikosti objektu



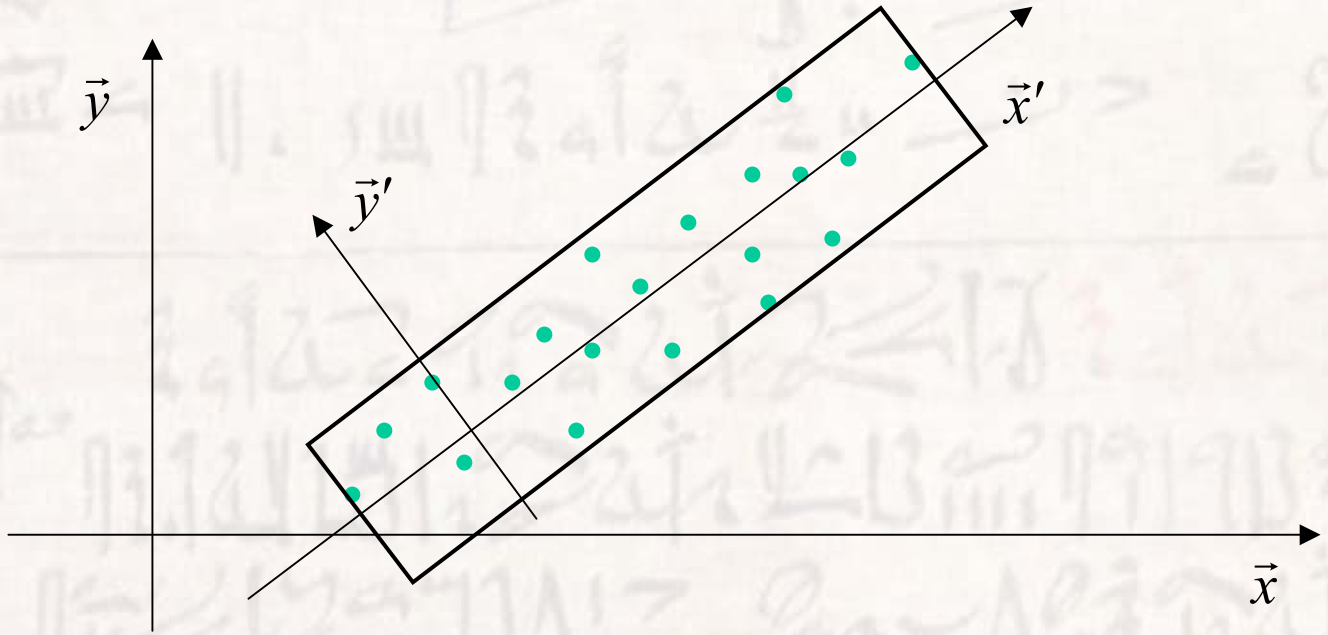
PCA

AABB Axis Aligned Bounding Box



PCA

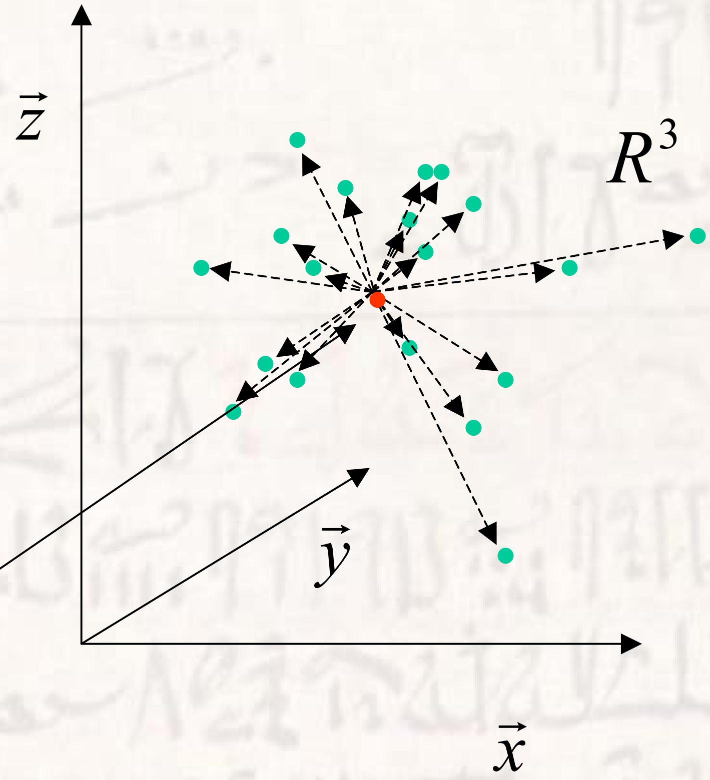
OBB – Oriented Bounding Box



PCA

Množina vstupních dat jsou body $x_1, \ldots, x_n$
v d-rozměrném prostoru R^d

$$x_1 = \left\langle x_1^1, x_1^2, \cdots, x_1^d \right\rangle$$
$$x_2 = \left\langle x_2^1, x_2^2, \cdots, x_2^d \right\rangle$$
$$\vdots$$
$$x_n = \left\langle x_n^1, x_n^2, \cdots, x_n^d \right\rangle$$



Těžiště $m = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$
(počátek našich souřadnic)

PCA

Definice

Def: Rozptyl (variance)

$$Var(X) = E(X - E(X))^2$$

Def: $E(X) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$

nebo

$$Var(X) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j\right)^2$$

Nechť: $y_i = x_i - m, \quad i = 1,2,\cdots n$

$$S = YY^T$$

$$S = \underbrace{\begin{bmatrix} y_1^1 & y_2^1 & \cdots & y_n^1 \\ y_1^2 & y_2^2 & & y_n^2 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ y_1^d & y_2^d & \cdots & y_n^d \end{bmatrix}}_{Y} \underbrace{\begin{bmatrix} y_1^1 & y_1^2 & \cdots & y_1^d \\ y_2^1 & y_2^2 & & y_2^d \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ y_n^1 & y_n^2 & \cdots & y_n^d \end{bmatrix}}_{Y^T}$$

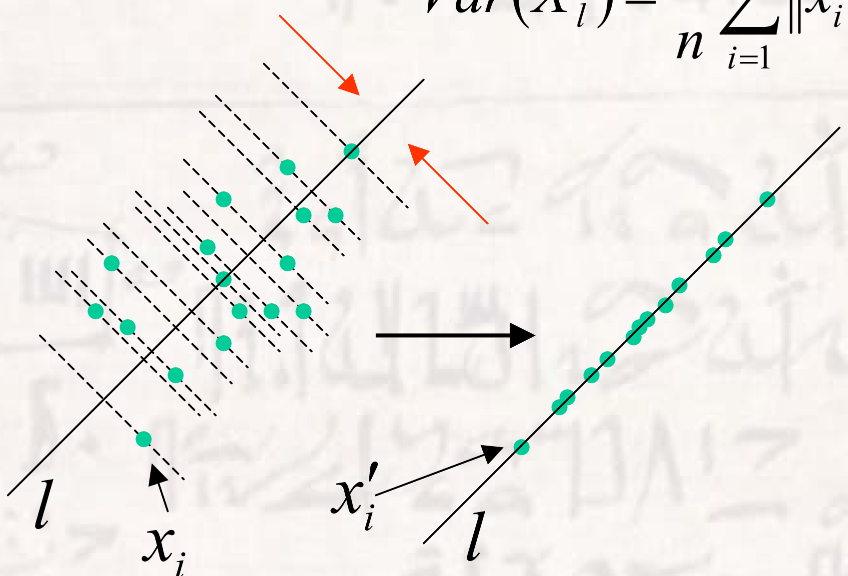
S v jistém smyslu měří varianci, tj. „rozptyl, rozptýlenost (scatterness)“ dat v různých směrech. Je S symetrická?

PCA

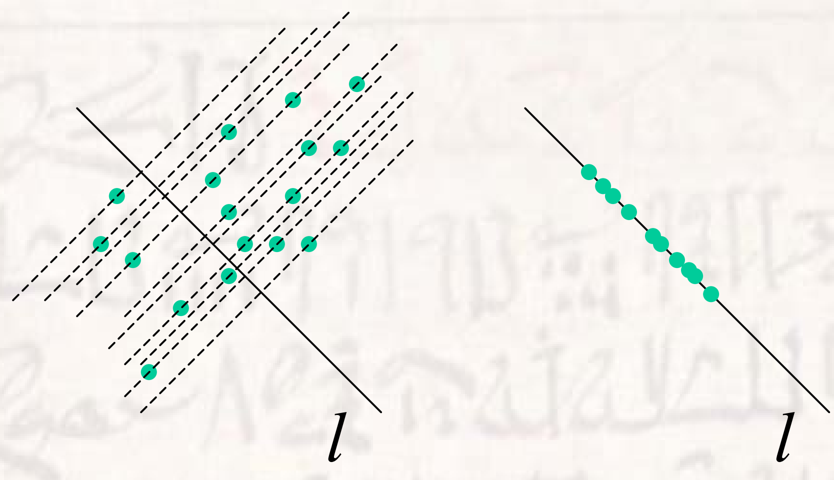
Variance promítnutých bodů

Mějme přímku *l*. Pokud na ní promítneme bod *x*, dostaneme bod *x'*:

$$Var(X_l) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left\| x_i' - m \right\|^2$$



Velká variance



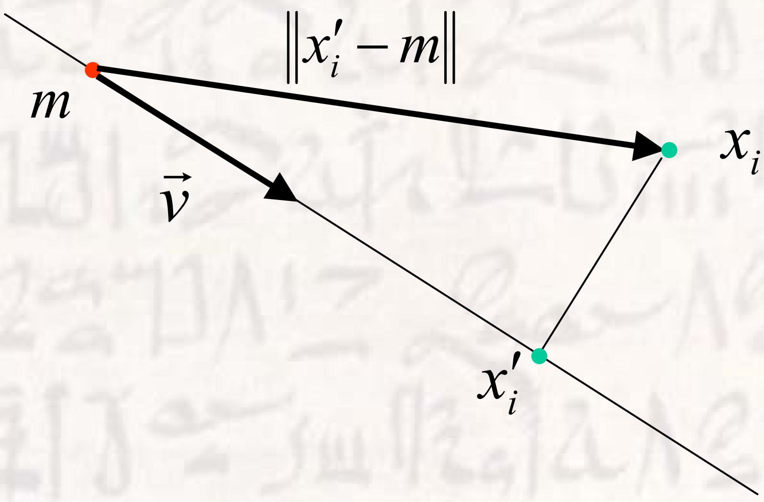
Malá variance

PCA

Variance promítnutých bodů

Mějme bod m a jednotkový vektor v, $|v|=1$. Projekci bodu x_i na přímku $l= m+vt$ můžeme vyjádřit následovně:

$$\left\|x_i' - m\right\| = \frac{\vec{v}}{\left\|\vec{v}\right\|} \cdot \left(x_i - m\right) = \vec{v} \cdot \vec{y}_i = \vec{v}^T \vec{y}_i$$



PCA

$$Var(l) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\|x_i' - m\|^2 = \frac{1}{n}\boxed{\sum_{i=1}^{n}\left(\vec{v}^T y_i\right)^2} = \frac{1}{n}\boxed{\left\|\vec{v}^T Y\right\|^2} =$$

$$= \frac{1}{n}\left\|Y^T\vec{v}\right\|^2 = \frac{1}{n}\left(Y^T\vec{v}\right)\cdot\left(Y^T\vec{v}\right) = \frac{1}{n}\vec{v}^T YY^T\vec{v} = \frac{1}{n}\vec{v}^T S\vec{v} = \frac{1}{n}\left(S\vec{v}\right)\cdot\vec{v}$$

$$\boxed{\sum_{i=1}^{n}\left(\vec{v}^T y_i\right)^2} = \sum_{i=1}^{n}\left(\left(v^1, v^2, \ldots, v^d\right)\begin{pmatrix} y_i^1 \\ y_i^2 \\ \vdots \\ y_i^d \end{pmatrix}\right)^2 = \left\|\left(v^1, v^2, \ldots, v^d\right)\begin{pmatrix} y_1^1 & y_2^1 & \cdots & y_n^1 \\ y_1^2 & y_2^2 & \cdots & y_n^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_1^d & y_2^d & \cdots & y_n^d \end{pmatrix}\right\|^2 = \boxed{\left\|\vec{v}^T Y\right\|^2}$$

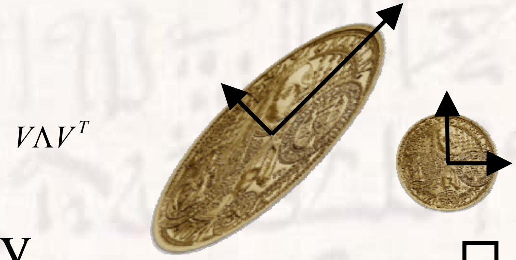
PCA

Věta 2.1: Nechť *f* je funkce $f:\left\{\vec{v}\in R^{d}\mid\left\|\vec{v}\right\|=1\right\}\rightarrow R$, taková, že $f(\vec{v})=(S\vec{v})\cdot\vec{v}\wedge S$ je symetrická matice. Pak extrémy funkce *f* jsou určeny vlastními vektory matice *S*.

Důkaz: Symetrická matice se dá rozložit na matici rotace a matici *scale*. Rotace zachovává velikost a *scale* má extrémy ve směru vlastních vektorů.

$$S=V\Lambda V^{T}\Rightarrow(S\vec{v})\cdot\vec{v}=\vec{v}^{T}V\Lambda V^{T}\vec{v}=\left(V^{T}\vec{v}\right)^{T}\Lambda\left(V^{T}\vec{v}\right)=$$

$$=\vec{v}'^{T}\Lambda\vec{v}'=\lambda_{1}\vec{v}_{1}'^{2}+\lambda_{2}\vec{v}_{2}'^{2}+\quad\cdots\quad+\lambda_{d}\vec{v}_{d}'^{2}$$



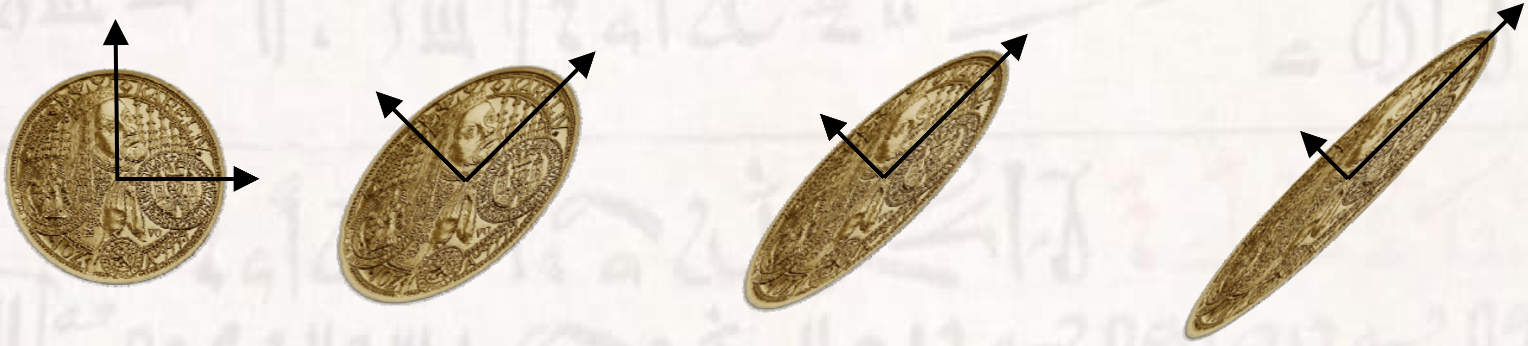
□

Důsledek: Vlastní vektory matice *S* jsou směry maximální / minimální variance.

Vlastní vektory a vl. hodnoty

Opakování zobrazení

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \vec{r}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \lambda_1 = 1.3, \quad \vec{r}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \lambda_2 = 0.7$$



$$A \qquad A^2 \qquad A^3$$

$$AA\vec{r}_1 = A\lambda_1\vec{r}_1 = \lambda_1^2\vec{r}_1$$

$$A^n\vec{r}_1 = \lambda_1^n\vec{r}_1$$

Co když matice nemá reálné vlastní hodnoty??

Vlastní vektory a vl. hodnoty

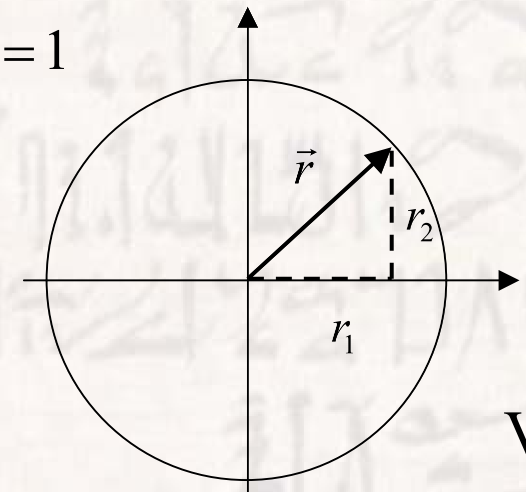
Mějme jednotkovou kružnici $r_1^2 + r_2^2 = 1$

$$r_1^2 = r_1 r_1, \quad r_2^2 = r_2 r_2$$

$$r_1 r_1 + r_2 r_2 = 1$$

$$\begin{bmatrix} r_1 & r_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \end{bmatrix} = 1$$

$$\vec{r}^{\,T} \vec{r} = 1$$



Nyní na vektor *r* aplikujeme lineární zobrazení maticí **A**.

$$\vec{r}\,' = A\vec{r}$$

$$\vec{r}\,'^{T} \vec{r}\,' = \left[A\vec{r}\right]^T \left[A\vec{r}\right] = c$$

$$\vec{r}^{\,T} A^T A \vec{r} = c$$

Symetrická matice

Pozitivně definitní

Výsledek: **A**^{T}**A** má reálné a kladné vl. vekt.

Vlastní vektory a vl. hodnoty

Protože $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ je *symetrická* a *pozitivně semidefinitní* má reálné a pozitivní vlastní hodnoty λ_1 a λ_2.
Nechť $\lambda_1 \geq \lambda_2, c_A = \lambda_1 / \lambda_2 > 1$ je tzv. *condition number* matice **A**.
• Jestliže je c_A je blízké nule, matice se nazývá *well-conditioned*
• Jestliže je c_A je vysoké, matice se nazývá se *ill-conditioned*
Vlastní hodnoty λ_1 a λ_2 se nazývají *singular values*.

Při řešení lineárního systému $A\vec{x} = \vec{b}$ se dostáváme do obtíží v případě, že c_A je velmi vysoké -> stačí malá změna ve vlastních hodnotách a výsledek bude značně jiný – numerická nestabilita!!

Komplexní čísla

Trocha historie nikoho nezabije…

- V Evropě 13. století došlo k oživení matematiky – jednak starší Řecké, jednak nové především Indické přes Arábii.
- Matematika do té doby neakceptovala záporná čísla.
- Záporná čísla jsou nutná k řešení kvadratické rovnice $ax^2+bx+c=0$. V 15. století to ještě nebylo pochopeno a kvadratická rovnice se dělila na čtyři speciální případy, které poskytovaly částečné řešení.
- V 16. století – uzákonění záporných čísel.

Komplexní čísla

- V 16. století – taktéž první náznaky komplexních čísel. Pozor! V té době ještě nebyla objevena symbolická matematika a všechny rovnice se zapisovaly slovně ;-)
- Cardano (1501-1576) v „Ars Magna“ zveřejnil záporná řešení k rovnicím př:

$$x^3 = cx + d, \quad x = \sqrt[3]{\left(d/2 + \sqrt{e}\right)} + \sqrt[3]{\left(d/2 - \sqrt{e}\right)}, \quad e = \left(d/2\right)^2 - \left(c/3\right)^3$$

- Bombelli (1526-1572) pokračoval s jeho výpočty. Řešil rovnici:

$$x^3 = 15x + 4$$

$$x = \sqrt[3]{\left(2 + \sqrt{-121}\right)} + \sqrt[3]{\left(2 - \sqrt{-121}\right)} = 2 + \sqrt{-1} + 2 - \sqrt{-1} = 4$$

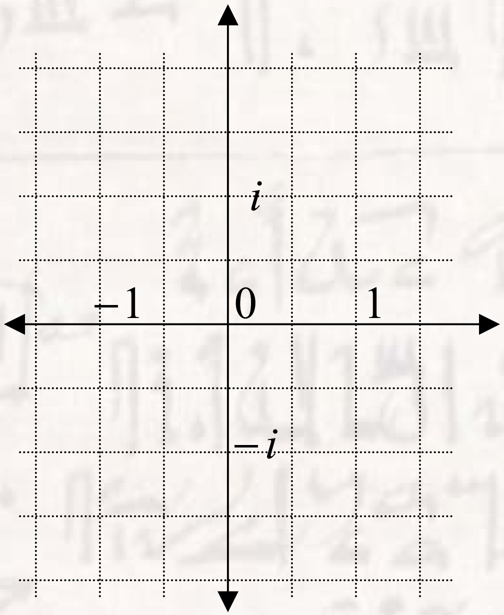
- Měl tedy k dispozici vše nutné k pochopení komplexních čísel – ale ještě zbývala dlouhá cesta.

Komplexní čísla

- Girard (1595-1632) poprvé stanovil principy algebry když vyslovil (ale nedokázal) „The fundamental theorem of algebra“ (Základní věta algebry).
- Descartes (1596–1650) nazval záporná řešení „false“ a další řešení (tj. komplexní) „imaginary“. Dále výzkum dlouho nepokročil.
- Průlom nastal v 18 století, kdy Euler (1707-1783), který byl vlivným matematikem, dokázal, že: $e^{ix} = \cos x + i \sin x$ díky tomu a dalším objevům bylo *i* akceptováno v matematice. … Začíná se používat komplexní rovina.
- V roce 1799 Gauss !Konečně! dokázal *Základní větu algebry*, že každý polynom n-tého stupně má právě *n* kořenů tvaru *a*+*bi,* pro nějaká reálná čísla *a* a *b*, odtud název *komplexní čísla* (ve smyslu řešení algebraických rovnic).

Komplexní čísla

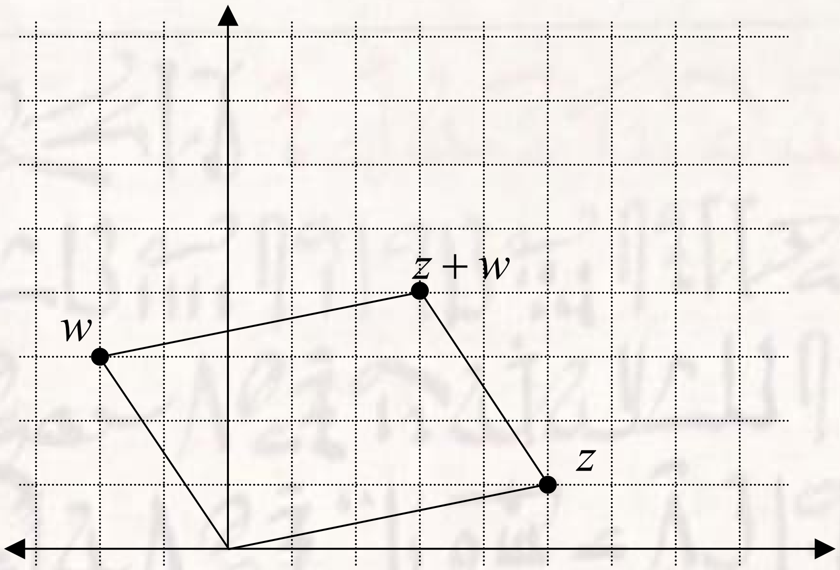
Od okamžiku, kdy Gauss dokázal Velkou větu algebry víme, že všechna komplexní čísla jsou tvaru *a*+*bi*, kde *a* a *b* jsou reálná čísla. Takže na jejich zobrazení používáme rovinu *x,y*.



Komplexní rovina se označuje ***C***.

Sčítání komplexních čísel

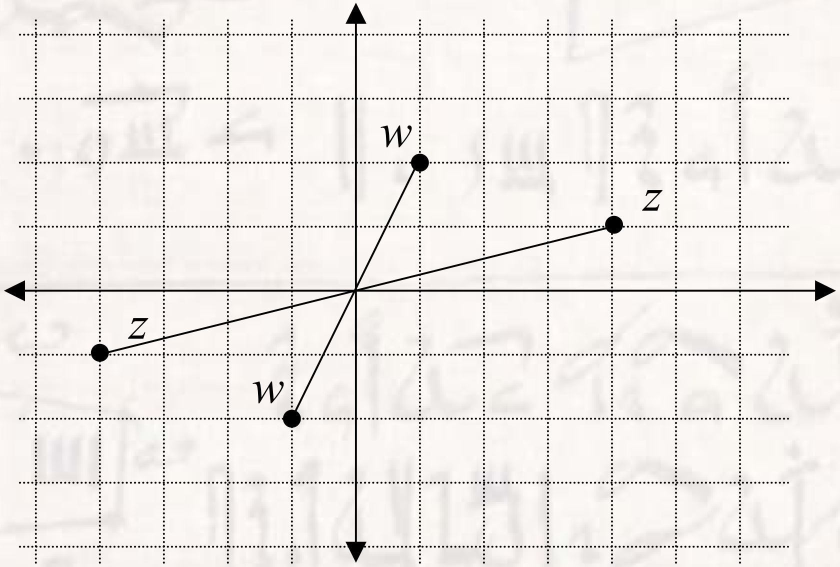
$$(5+i)+(-2+3i)=5-2+i+3i=3+4i$$



Komplexní čísla

Negace a odčítání

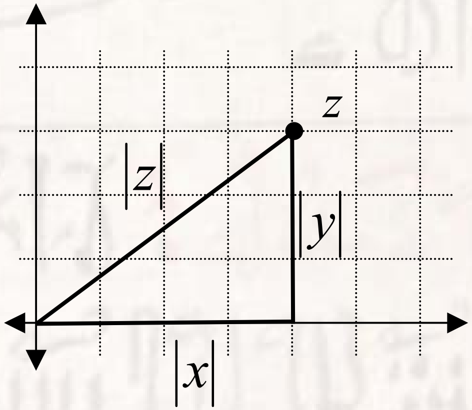
$$-(x+iy)=-x-iy$$



Negace může být interpretována jako rotace o 180^0 okolo počátku.

Absolutní hodnota

Absolutní hodnotu pro komplexní čísla definujeme jako $|z|$=vzdálenost od počátku souřadnic.



Z Pythagorovy věty:

$$z = x + iy$$

$$|z|^2 = x^2 + y^2$$

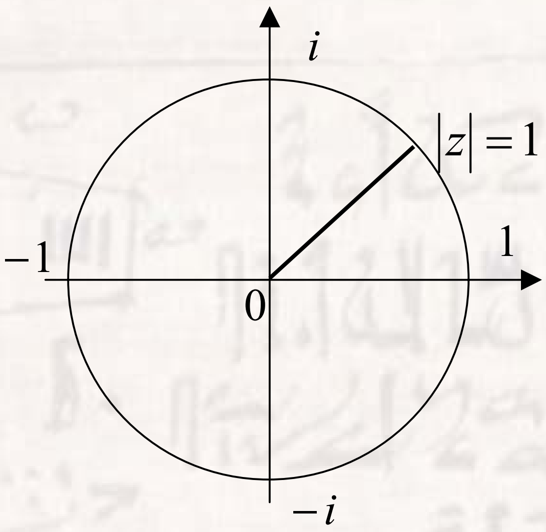
$$|z| = \sqrt{(x^2 + y^2)}$$

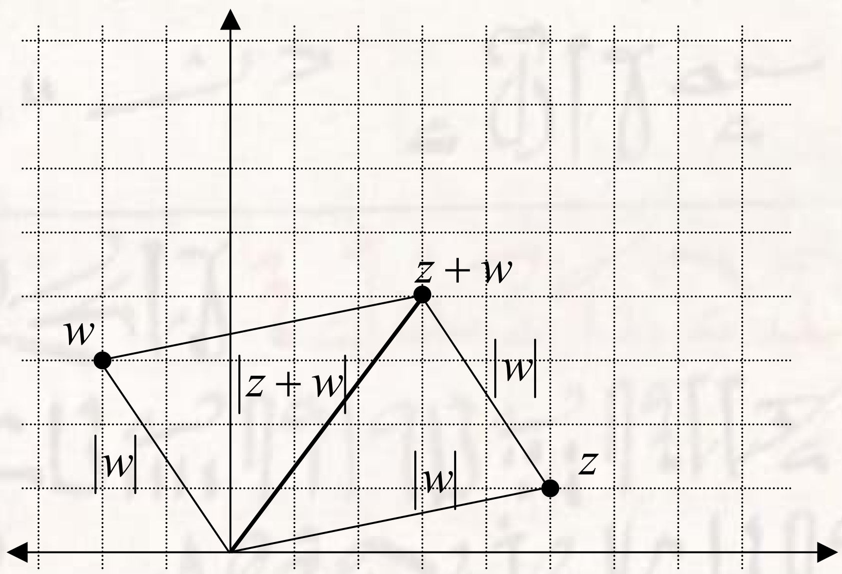
Komplexní čísla

Trojúhelníková nerovnost:

$$|z+w| \le |z| + |w|$$

Všechna jednotková komplexní čísla $|z|=1$ budou ležet na jednotkové kružnici:





Komplexní čísla

Násobení komplexních čísel:

$$(x+iy)(u+iv)=(xu-yv)+i(xv+yu)$$

Násobení komplexního čísla reálnou části:

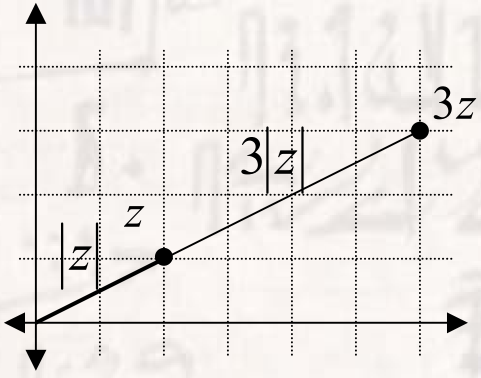
Obecně: $|zw|=|z||w|$

$$|z|^2=x^2+y^2$$

$$|w|^2=u^2+v^2$$

$$|zw|^2=(xu-yv)^2+(xv+yu)^2=$$
$$=(x^2+y^2)(u^2+v^2)$$

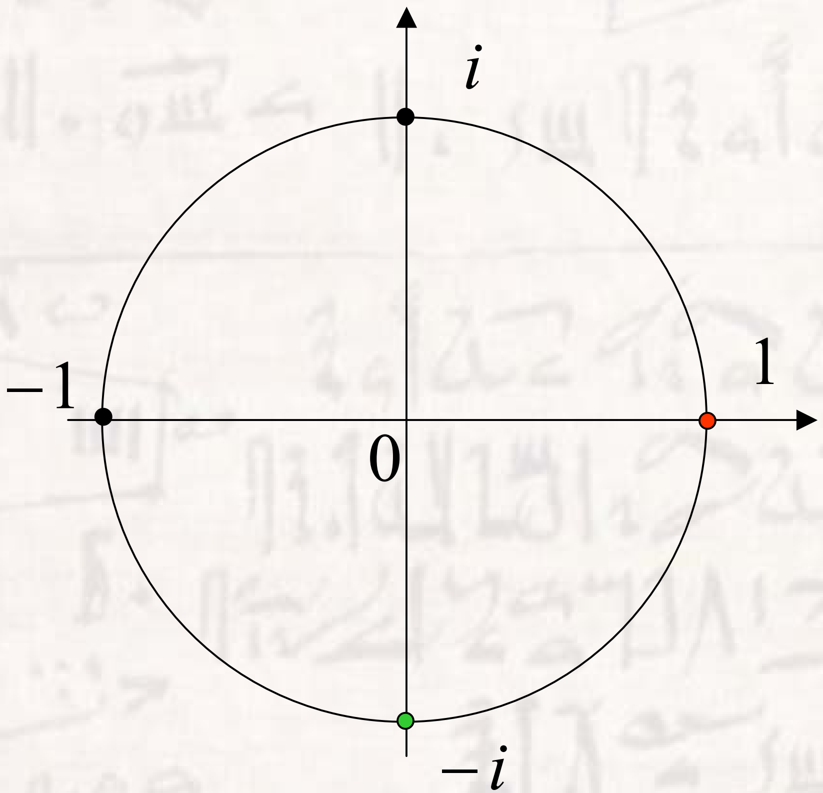
Opět Pythagorova věta.



Geometrický – jestliže komplexní číslo vynásobíme třemi, zvýšíme tím třikrát vzdálenost od počátku.

Komplexní čísla

Mocniny komplexní části:



- $i^2 = \sqrt{-1}\sqrt{-1} = -1$
- $i^3 = i^2 i = -i$
- $i^4 = i^2 i^2 = (-1)(-1) = 1$

i je kořenem čtvrté odmocniny z jedničky (druhým je –*i*)

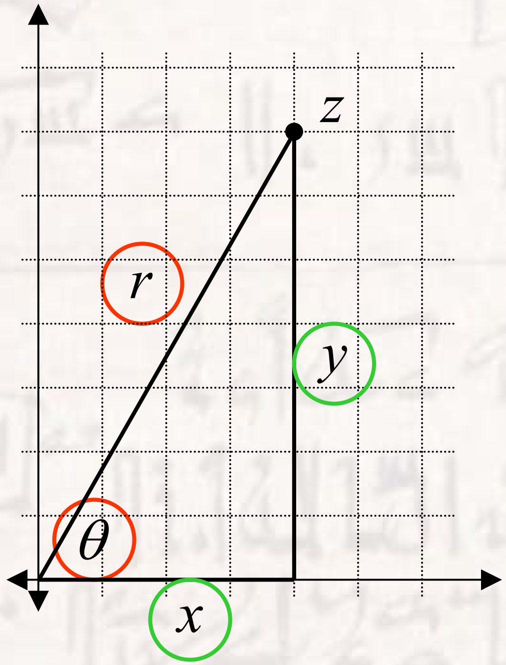
Násobení komplexního čísla *i*:

$$iz = i(x + iy) = -y + ix$$

Rotace o 90^0

Komplexní čísla

Polární souřadnice:



$$x = r\cos(\theta)$$
$$y = r\sin(\theta)$$
$$z = x + iy$$
$$= r\cos(\theta) + ir\sin(\theta)$$
$$= r(\cos(\theta) + i\sin(\theta))$$
$$= |z|(\cos(\theta) + i\sin(\theta))$$

$$r = |z| = \sqrt{(x^2 + y^2)}$$

cos(a) + *i*sin(a) =1

Každé komplexní číslo z

je součinem |z| a cos(a) + *i*sin(a)

Komplexní čísla

Tvrzení: Násobení komplexních čísel je kombinací *scalingu* a rotace. Konktrétně:

$$|zw| = |z||w|$$

$$\arg(zw) = \arg(z) + \arg(w)$$

kde arg(z)= úhel komplexního čísla z.

Důkaz:

Máme:

$$z = |z|(\cos(\theta) + i\sin(\theta))$$

$$w = |w|(\cos(\phi) + i\sin(\phi))$$

Chceme:

$$zw = |zw|(\cos(\theta+\phi) + i\sin(\theta+\phi))$$

$$\begin{aligned}
zw &= |z|(\cos(\theta) + i\sin(\theta))|w|(\cos(\phi) + i\sin(\phi)) \\
&= |zw|(\cos(\theta) + i\sin(\theta))(\cos(\phi) + i\sin(\phi)) \\
&= |zw|\begin{pmatrix} (\cos(\theta)\cos(\phi) - \sin(\theta)\sin(\phi)) \\ + i(\cos(\theta)\sin(\phi) + \sin(\theta)\cos(\phi)) \end{pmatrix} \\
&= |zw|(\cos(\theta+\phi) + i\sin(\theta+\phi))
\end{aligned}$$

□

Komplexní čísla

Lemma:

$$\cos(\alpha+\beta)=\cos(\alpha)\cos(\beta)-\sin(\alpha)\sin(\beta)$$
$$\sin(\alpha+\beta)=\sin(\alpha)\cos(\beta)+\cos(\alpha)\sin(\beta)$$

Důkaz:

$$A_\alpha=\begin{bmatrix}\cos(\alpha) & -\sin(\alpha)\\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha)\end{bmatrix},\quad A_\beta=\begin{bmatrix}\cos(\beta) & -\sin(\beta)\\ \sin(\beta) & \cos(\beta)\end{bmatrix}$$

$$A_{(\alpha+\beta)}=A_\alpha A_\beta=$$

$$=\begin{bmatrix}\cos(\alpha)\cos(\beta)-\sin(\alpha)\sin(\beta) & -\cos(\alpha)\sin(\beta)-\sin(\alpha)\cos(\beta)\\ \sin(\alpha)\cos(\beta)+\cos(\alpha)\sin(\beta) & -\sin(\alpha)\sin(\beta)+\cos(\alpha)\cos(\beta)\end{bmatrix}$$

□

Komplexní čísla

Závěr: Rotaci v rovině můžeme provádět buď pomocí matic

$$x_\alpha = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Nebo pomocí násobení komplexního čísla *z* **jednotkovým** komplexním číslem *w*, které nám otočí výsledek u úhel $\arg(w)$.

$$z_\alpha = z w_\alpha^1$$
$$w_\alpha^1 = (\sin(\alpha) + i\cos(\alpha))$$

Kde násobení je:

$$(x+iy)(u+iv) = (xu - yv) + i(xv + yu)$$

Quaterniony

Sir William Rowan Hamilton (1809 – 1865) objevil quaterniony roku 1843. Hamiltonovým cílem bylo vyjádřit rotace v 3D prostoru obdobným způsobem, jako jsou ve 2D prostoru vyjádřeny pomocí komplexních čísel.

- První pokus zobecnění komplexních čísel:

$$a + ib + jc \quad a, b, c \in R$$

$$i^2 = j^2 = -1$$

- Nikdy neuspěl

Věta(Knneth O. May 1966): *Množina třírozměrných komplexních čísel není uzavřena na násobení.*

Quaterniony

Věta 3.1: (Knneth O. May 1966): *Množina třírozměrných komplexních čísel není uzavřena na násobení.*

Důkaz: sporem

Předpokládejme, že platí obvyklá aritmetická pravidla a $i^2 = j^2 = -1$

Dále předpokládejme, že uzavřené násobení existuje.

Z uzavřenosti násobení: $\exists(a,b,c \in R): ij = a + ib + jc$

Vynásobíme rovnici *i*: $-j = -b + ia + ijc$

Provedeme substituci první rovnice do druhé:

$$-j = -b + ia + (a + ib + jc)c$$

$$0 = (ac - b) + i(a + bc) + j(c^2 + 1) \Rightarrow ac - b = 0 \wedge a + bc = 0 \wedge \underline{c^2 + 1 = 0}$$

Spor, *c* je podle předpokladu reálné. □

Quaterniony

- Rok 1843, říjen, Dublin, jedno krásné pondělí. Hamilton dospěl k závěru, že bude potřebovat čtyři čísla pro popis rotace následované změnou měřítka
  1. Změna měřítka
  2. Počet stupňů rotace
  3. Dvě čísla udávající rovinu otočení
- Hamilton nalezl uzavřené násobení pro čtyřrozměrná komplexní čísla tvaru:

$$ix + jy + kz$$

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$$

- Tato čtyřrozměrná komplexní čísla nazval quaterniony
- Quaternion se obvykle zapisuje jako dvojice [*s*,*v*], kde $s \in R, v \in R^3$

  s se nazývá *skalární část* a v se nazývá *vektorová část*.