

Den bedste linje og den bedste plan

28. august 2025

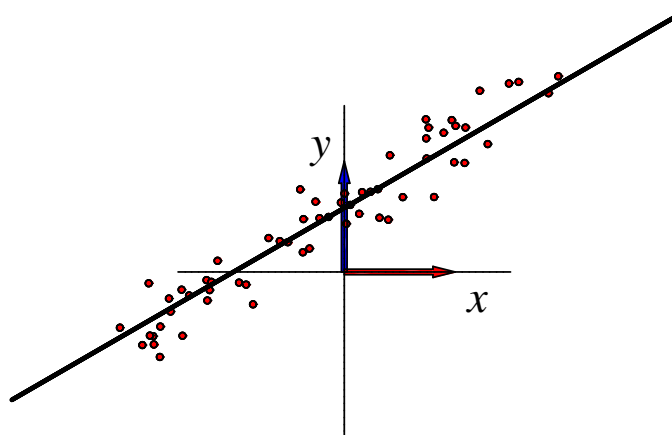
Indhold

1	Introduktion	2
1.1	Nogle centrale begreber i denne fremstilling	2
1.2	Linjer og punkter i planen	3
2	Linje-approximation til en punktmængde	4
2.1	Hvor stor er fejlen?	5
2.2	Teoretiske eksperimenter	7
2.3	Massemidtpunktet	8
2.4	A, B, C matricen og den bedste værdi af v	9
3	Intermezzo: Hvornår er $C = 0$ og $A = B$?	12
4	Centrering	13
4.1	Inertimoment-matricen	14
5	SVD alternativet	15
5.1	Dekomponering	15
5.2	$M \cdot M^T$ og Inertimoment-matricen	16
5.3	Det generelle problem og SVD-løsningen	17
6	Flere eksempler	18
6.1	PCA for punktmængder i 2D	18
6.2	Projektioner på de principale akser	19
7	SVD som projektions-operator i planen	21
8	Videregående overvejelser	23
8.1	Punktmængder i 3D	23
8.2	Linje-approximationer i 3D; den bedste, den dårligste, og den mellemgode	24

8.3 Plan-approksimationer i 3D; den bedste, den dårligste, og den mellemgode	25
9 SVD som projektions-operator i rummet	27
10 Klynger	29
10.1 Definition af de bedste klyngedannelser	30
10.2 PCA-hjælp hen imod de bedste klyngedannelser	31

1 Introduktion

Hvordan findes den "geometrisk bedste" rette linje igennem en given mængde af punkter i planen og i rummet? Hvad betyder "geometrisk bedst" og er der altid præcis én ret linje, der så er den bedste? Eksperimenterne og opgaverne i denne note går ud på at besvare disse spørgsmål, først via en direkte simpel analyse og derefter ved hjælp af SVD metoden brugt på punkternes data-matrix. Denne artikel er en udvidelse af en tidligere note om eksperimentel matematik af Poul G. Hjorth og Steen Markvorsen i Matematiklærerforeningens inspirationsbog [3].



Figur 1: En linje er her – på øjemål – skitseret som en approksimation til den givne viste punkt-mængde. Er det den bedste tilnærmelse?

1.1 Nogle centrale begreber i denne fremstilling

Data-punkter og deres datamatrix; approksimerende rette linjer i plan og rum; approksimerende planer i rummet; ligningen for en linje i planen; retningsvektor for en linje i plan og rum; parameterfremstilling for en linje i plan og rum; akkumulerede cirkelskivearealer; akkumulerede kuglefladearealer; inertimomenter; planmomenter; bestemmelse af minima og maksima for funktioner af én variabel; produkter af (2×2) -matricer og (3×3) -matricer; additionsformler for

cosinus og sinus; SVD (Singular Value Decomposition); PCA (Principal Component Analysis) i 2D og 3D; projektioner på principale akser og principale planer; bedste deling af punktmængder i to klynger i rummet.

1.2 Linjer og punkter i planen

Vi ser på n punkter i planen:

$$P = \{p_1, p_2, p_3, \dots, p_n\}, p_i = (x_i, y_i) \quad , \quad (1.1)$$

og ønsker at approksimere dem med en ret linje L med ligningen

$$L : ax + by + c = 0 \quad , \quad (1.2)$$

hvor a, b , og c er konstanter (dog sådan at a og b ikke samtidig er 0).

OPGAVE 1.1. Her er nogle kurver i (x, y) -planen, repræsenteret ved deres respektive ligninger. Hvilke af disse kurver er rette linjer? Hvad er a, b , og c så for hver af de rette linjer blandt disse kurver?

$$\begin{aligned} y &= 3 \\ y &= 3x^2 \\ x &= 4y + 7 \\ y &= -7x + 4y^3 \\ 1 &= x^2 + y^2 \\ x &= 6y - 3 + 14x \quad . \end{aligned} \quad (1.3)$$

OPGAVE 1.2. Hvorfor må a og b ikke samtidig være 0 i fremstillingen (1.2)?

Da a og b ikke samtidig er 0 kan vi antage, at $a = \sin(v)$ og $b = -\cos(v)$ hvor v er en vinkel i intervallet $]0, \pi]$; linjen L har derefter ligningen:

$$L : x \sin(v) - y \cos(v) + c = 0 \quad . \quad (1.4)$$

OPGAVE 1.3. Hvorfor er den antagelse OK?

OPGAVE 1.4. Hvad er værdien af v for hver af de *rette linjer*, der er angivet i opgave 1.1?

Fordelen ved at indføre vinklen v er rimelig klar: Nu kan linjen beskrives ved brug af kun 2 konstanter nemlig v og c , hvor vi før brugte 3: a, b , og c .

OPGAVE 1.5. Rette linjer, der har en ligning på den måske mere velkendte form: $L : y = \alpha x + \beta$ kan jo også beskrives med kun to konstanter! Hvorfor gør vi så ikke det i stedet?

OPGAVE 1.6. En *parameterfremstilling* for en ret linje igennem punktet (x_0, y_0) og med retningsvektor $(\alpha, \beta) \neq (0, 0)$ har den generelle form:

$$\gamma(t) = (x(t), y(t)) = (x_0 + \alpha \cdot t, y_0 + \beta \cdot t) \quad \text{for } t \in]-\infty, \infty[\quad . \quad (1.5)$$

Bestem sådanne parameterfremstillinger for de rette linjer, der optræder i opgave 1.1.

Bemærkning 1.7. Med fremstillingen i (1.4) for linjen L er vektoren $(\cos(v), \sin(v))$ en *enhedsretningsvektor* for linjen og vektoren $(\sin(v), -\cos(v))$ er en *enheds-normalvektor* for linjen. Specielt er v så vinklen mellem linjen og x -aksen og $v + \pi/2$ er vinklen mellem normalen til linjen og x -aksen. Vi bruger nedenfor udtrykket (1.4) fordi den giver anledning til en meget simpel afstands-formel for afstanden fra ethvert punkt i (x, y) -planen til linjen L , se opgave 2.2 nedenfor.

2 Linje-approximation til en punktmængde

Vi vil indføre et mål for, hvor tæt punkterne ligger ved eller på linjen L , eller med andre ord et mål for, hvor godt linjen repræsenterer/approksimerer punkterne.

Oftentimes er det jo sådan, at punkterne er fremkommet ved et laboratorieforsøg hvor man for eksempel har aflæst et antal sammenhørende værdier for strøm igennem en modstand og den tilhørende spænding over modstanden. Så skal der helst være (ifølge Ohm's lov) en nogenlunde lineær sammenhæng mellem strøm og spænding, dvs. målepunkterne skal ligge tæt ved en ret linje i et strøm-spændings-koordinatsystem, og hældningskoefficienten af den rette linje er netop værdien af den Ohm'ske modstand.

Men målepunkter vil sædvanligvis ikke ligge eksakt på en ret linje, så vi har brug for at kunne finde den linje, der passer bedst.

Til den ende gør vi følgende: Vælg (for eksemplets skyld) 7 tilfældige punkter $\{p_1, p_2, p_3, \dots, p_7\}$ i planen. Vi antager, at planen er udstyret med et sædvanligt retvinklet koordinatsystem, så de 7 punkter har koordinaterne:

$$\begin{aligned} p_1 &= (x_1, y_1) \\ p_2 &= (x_2, y_2) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ p_7 &= (x_7, y_7) \quad . \end{aligned} \quad (2.1)$$

Vælg dernæst en ret linje L i planen som et gæt på den bedste rette linje, der tilnærmer de valgte punkter. Find dernæst ligningen for linjen på formen 1.4. Se for eksempel figur 2.

Eksempelvis er der i den figur vist 7 punkter der har følgende koordinater med hensyn til det viste koordinatsystem:

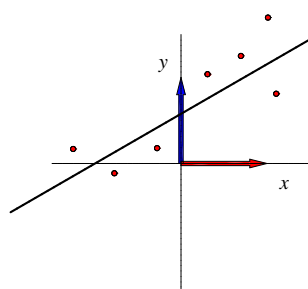
$$[-.278, .178], [.308, 1.04], [.696, 1.25], [-1.25, .169], [-.775, -.113], [1.11, .811], [1.01, 1.70] , \quad (2.2)$$

og den viste linje har ligningen:

$$L : \frac{1}{2}x - \frac{\sqrt{3}}{2}y + \frac{1}{2} = 0 \quad , \quad (2.3)$$

dvs. linjen er karakteriseret ved, at $v = \pi/6$ og $c = 1/2$, således at en retningsvektor for linjen er $(\cos(v), \sin(v)) = (\sqrt{3}/2, 1/2)$ og linjen går igennem punktet $(0, 1/\sqrt{3})$.

Men det gæt er ikke den bedste rette linje, det er ikke den linje, der bedst approksimerer de syv punkter. For eksempel går linjen ikke igennem massemidtpunktet for de 7 punkter – se sætning 2.6 nedenfor. Den bedste linje er vist i figur 6; det er den vi er på jagt efter.



Figur 2: Syv data-punkter i planen og en øjemåls-approksimerende ret linje.

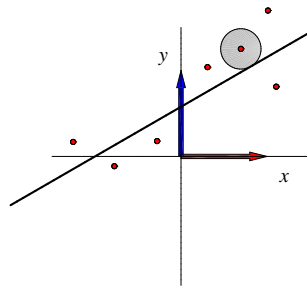
2.1 Hvor stor er fejlen?

Hvert punkt $p_i = (x_i, y_i)$ i mængden af punkter, $P = \{p_1, p_2, p_3, \dots, p_7\}$, bidrager selvstændigt med et bidrag til målet for hvor langt punktmængden er fra at ligge på den givne rette linje L . Lad os først betragte det valgte punkt p_1 . Det punkt har en afstand fra L ; lad os kalde den afstand for r_1 . Tegn nu den cirkel, der har radius r_1 og centrum i p_1 - det er den cirkel, der lige præcis tangerer L , se figur 3.

Den cirkel omkredser et areal, som er givet ved

$$\mathcal{A}_1 = \pi r_1^2 \quad . \quad (2.4)$$

Dette areal udregnes nu for alle punkterne og arealerne lægges sammen - bemærk, at overlap



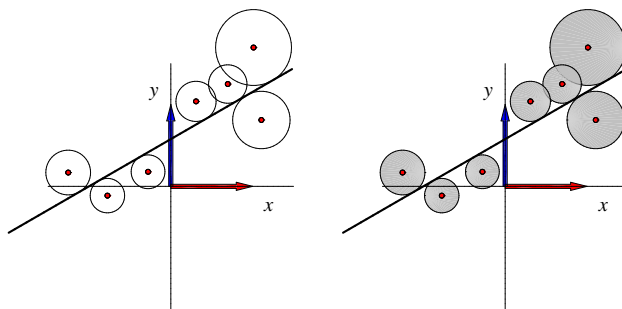
Figur 3: Et af de 7 punkter med linje-tangerende cirkel med radius r_1 .

tælles med, se figur 4:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A} &= \pi \sum_{i=1}^{i=7} \mathcal{A}_i \\
 &= \sum_{i=1}^{i=7} \pi r_i^2 \\
 &= \pi (r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_7^2) \\
 &= S\pi \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{2.5}$$

hvor vi har indført betegnelsen S for

$$S = r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_7^2 \quad .
 \tag{2.6}$$



Figur 4: Det totale cirkelskive-areal er mål for hvor meget punkterne afviger fra at ligge på den valgte rette linje. Alle overlap tælles med i arealet.

Kunsten er nu at finde den linje, der giver den mindst mulige totale sum af cirkelskivearealerne, dvs. den mindst mulige værdi af S . Det er den linje, vi vil kalde den "bedste" approksimation til den givne punktmængde.

Bemærkning 2.1. Størrelsen S måler faktisk også det såkaldte *inertimoment* af punktmængden, dvs. den totale kinetiske energi i systemet hvis alle punkter udstyres med masse 1 og roteres (i rummet, som indeholder den valgte (x, y) -plan) omkring den valgte linje med vinkelhastighed 1. Se [4, Kapitlerne 6, 8, og 9]. Hvis alle punkter ligger på linjen (som så er den bedste), så er denne energi 0, altså inertimomentet er 0; og hvis alle punkter, eller blot massemidtpunktet, ligger langt fra linjen, så er inertimomentet stort.

OPGAVE 2.2. Vis, at med den valgte ligning (1.4) for L kan r_1 , og generelt r_i , udtrykkes ved v og c på følgende måde:

$$r_i = |x_i \sin(v) - y_i \cos(v) + c| \quad . \quad (2.7)$$

Så har vi

$$S = S(v, c) = \sum_{i=1}^{i=7} (x_i \sin(v) - y_i \cos(v) + c)^2 \quad , \quad (2.8)$$

og den resterende opgave er altså at finde v og c sådan at dette udtryk for S (med de givne punkt-koordinater) er mindst mulig.

Den linje, vi har valgt at gætte på i første omgang kan roteres og parallelforskydes med henblik på at gøre S -værdierne mindre, men omkring hvilket punkt skal vi rotere og i hvilken retning skal vi parallelforskyde?

2.2 Teoretiske eksperimenter

Som *et eksperiment* kan vi først prøve at finde den bedste linje blandt alle de linjer, der er parallelle med x -aksen. Vi har så konstant $v = 0$ for alle de linjer, vi nu kigger på, og derfor er

$$L : y = c \quad , \quad (2.9)$$

og dermed

$$\begin{aligned} S = S(0, c) &= \sum_{i=1}^{i=7} (y_i - c)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{i=7} (y_i^2 - 2c y_i + c^2) \\ &= 7c^2 - 2c \left(\sum_{i=1}^{i=7} y_i \right) + \left(\sum_{i=1}^{i=7} y_i^2 \right) \quad , \end{aligned} \quad (2.10)$$

Funktionen S er så en funktion af den ene variable c og vi kan derfor finde den mindste værdi som S antager ved at finde den værdi af c for hvilken grafen for funktionen $S(c)$ har vandret tangent, altså hvor $S'(c) = 0$:

$$S'(c) = 14c - 2 \left(\sum_{i=1}^{i=7} y_i \right) \quad , \quad (2.11)$$

så den søgte c -værdi er derfor

$$c = \frac{1}{7} \left(\sum_{i=1}^{i=7} y_i \right) , \quad (2.12)$$

og den søgte linje parallel med x -aksen er derfor:

$$y = \frac{1}{7} \left(\sum_{i=1}^{i=7} y_i \right) . \quad (2.13)$$

Vi kan naturligvis som et næste eksperiment også finde den linje parallel med y -aksen, som giver mindst S blandt alle linjer af formen $x = -c$, hvor c igen opfattes som den ene variable. Dette svarer til at vælge fast vinkel $\nu = \pi/2$ i det generelle udtryk (2.8).

OPGAVE 2.3. Tegn grafen for $S(c)$ i hvert af de to betragtede tilfælde for de konkrete punkter i figur 2 og aflæs de c -værdier der giver mindste $S(c)$ for de vandrette henholdsvis lodrette linjer

2.3 Massemidtpunktet

De to akseparallelle linjer, vi dermed har fundet, har et skæringspunkt; det er *massemidtpunktet*, eller *middel-punktet*, eller *centreringspunktet* for de 7 punkter. Vi kalder det massemidtpunkt for punktmængden, idet vi fysisk igen tænker punkter udstyret hver med massen 1.

$$\mathcal{P} = (\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y) = \frac{1}{7} \left(\sum_{i=1}^{i=7} x_i, \sum_{i=1}^{i=7} y_i \right) . \quad (2.14)$$

OPGAVE 2.4. Find massemidtpunktets koordinater for de konkret givne 7 punkter i figur 2 og sammenlign med resultatet i opgave 2.3.

OPGAVE 2.5. Vis, at massemidtpunktet for n punkter i (x, y) -planen også kan findes som det (entydige) punkt $\mathcal{P} = (\alpha, \beta)$, der minimerer summen af *kvadratafstandene* til de givne datapunkter, altså (efter Apollonius):

$$\mathcal{P} = \operatorname{argmin}_{(\alpha, \beta)} \sum_{i=1}^{i=n} ((x_i - \alpha)^2 + (y_i - \beta)^2) . \quad (2.15)$$

Ovenstående eksperimenter peger således på et ganske bestemt punkt, massemidtpunktet \mathcal{P} , omkring hvilket det dernæst er oplagt at *rottere* en linje for at finde den linje, der giver den mindste værdi for S blandt alle de linjer, der går igennem massemidtpunktet.

Lad os dog først få den gode idé, at vi måske kan benytte ovenstående fremgangsmåde til helt generelt at *bevise*, at følgende faktisk er et korrekt udsagn for enhver punktmængde med et vilkårligt antal punkter n :

Sætning 2.6. Den mindste værdi for S findes for en linje, som går igennem massemidtpunktet for de givne punkter.

Bevis. Ideen er først at vælge v til en fast værdi (ikke nødvendigvis hverken 0 eller $\pi/2$) og så finde den c -værdi som minimerer S for den givne v -værdi. Vi har (stadig med $n = 7$, men det generelle tilfælde er helt ækvivalent):

$$\begin{aligned} S(c) &= \sum_{i=1}^{i=7} (x_i \sin(v) - y_i \cos(v) + c)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{i=7} \left(c^2 + 2c(x_i \sin(v) - y_i \cos(v)) + (x_i \sin(v) - y_i \cos(v))^2 \right) \\ &= 7c^2 + 2c \sum_{i=1}^{i=7} (x_i \sin(v) - y_i \cos(v)) + \sum_{i=1}^{i=7} (x_i \sin(v) - y_i \cos(v))^2 \quad , \end{aligned} \quad (2.16)$$

hvor v og x_1, \dots, x_7 , og y_1, \dots, y_7 jo er konstanter. Vi differentierer S som funktion af c og sætter det resulterende udtryk lig med 0:

$$\begin{aligned} S'(c) &= 14c + 2 \sum_{i=1}^{i=7} (x_i \sin(v) - y_i \cos(v)) \\ &= 14c + 2 \sin(v) \sum_{i=1}^{i=7} x_i - 2 \cos(v) \sum_{i=1}^{i=7} y_i \quad , \end{aligned} \quad (2.17)$$

som er 0 hvis og kun hvis

$$\begin{aligned} c &= -\sin(v) \frac{1}{7} \sum_{i=1}^{i=7} x_i + \cos(v) \frac{1}{7} \sum_{i=1}^{i=7} y_i \\ &= -\mathcal{P}_x \sin(v) + \mathcal{P}_y \cos(v) \quad . \end{aligned} \quad (2.18)$$

Vi indsætter nu denne c -værdi i ligningen for L og får dermed den bedste retlinjede approksimation til de 7 punkter blandt alle de linjer der har den konstante givne v værdi

$$L_v : (x - \mathcal{P}_x) \sin(v) - (y - \mathcal{P}_y) \cos(v) = 0 \quad . \quad (2.19)$$

Alle disse linjer - dvs. for et vilkårligt valg af vinklen v - går tydeligvis igennem massemidtpunktet $\mathcal{P} = (\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y)$ for de 7 punkter! Og det var det, vi skulle bevise: Hvis linjen ikke går igennem massemidtpunktet, så kan den ikke være bedst mulig. \square

2.4 A, B, C matricen og den bedste værdi af v

Det er nu klart, at for at finde den bedste rette linje skal vi blot betragte alle linjerne L_v , som går igennem massemidtpunktet, og blandt dem finde den eller de linje(r) der har v -værdi(er) for hvilke(n) $S(v)$ (som funktion nu kun af v) er mindst mulig.

Overraskende nok er der enten lige præcis én sådan linje eller også er alle linjerne igennem massemidtpunktet løsninger til problemet!

Det kan vi se på følgende måde:

Da vi kun kigger på linjerne givet ved udtrykket (2.19) får vi følgende relativt simple udtryk for $S(v)$:

$$\begin{aligned}
 S(v) &= \sum_{i=1}^{i=7} ((x_i - \mathcal{P}_x) \sin(v) - (y_i - \mathcal{P}_y) \cos(v))^2 \\
 &= \sin^2(v) \sum_{i=1}^{i=7} (x_i - \mathcal{P}_x)^2 + \cos^2(v) \sum_{i=1}^{i=7} (y_i - \mathcal{P}_y)^2 - 2 \cos(v) \sin(v) \sum_{i=1}^{i=7} (x_i - \mathcal{P}_x)(y_i - \mathcal{P}_y) \\
 &= B \sin^2(v) + A \cos^2(v) - 2C \cos(v) \sin(v) \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{2.20}$$

hvor vi har indført følgende betegnelser for de tre *konstanter*:

$$\begin{aligned}
 A &= \sum_{i=1}^{i=7} (y_i - \mathcal{P}_y)^2 \\
 B &= \sum_{i=1}^{i=7} (x_i - \mathcal{P}_x)^2 \\
 C &= \sum_{i=1}^{i=7} (x_i - \mathcal{P}_x)(y_i - \mathcal{P}_y) \quad .
 \end{aligned}
 \tag{2.21}$$

Herefter kan vi udtrykke $S(v)$ ganske kort:

$$S(v) = \begin{bmatrix} \cos(v) & \sin(v) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A & -C \\ -C & B \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} \quad .
 \tag{2.22}$$

OPGAVE 2.7. Bestem konstanterne A , B , og C for de konkret givne punkter i figur 2.

Vi må nu eksperimentere lidt med funktionen $S(v)$ for at se, hvordan dens minimumspunkter afhænger af konstanterne A , B , og C :

Hvis f.eks. $C = 0$ og $A = B$, så er $S(v)$ konstant, $S(v) = A$ for alle v . Alle linjer igennem massemidtpunktet giver i så fald den samme mindste S -værdi og er derfor lige gode – og bedst – og værst!

Vi vil nu indse, at hvis det *ikke* gælder, at $C = 0$ og $A = B$, så er der netop én ret linje, der approksimerer de givne punkter bedst muligt.

Lad os først se på differentialkvotienten:

$$\begin{aligned}
 S'(v) &= 2B \cos(v) \sin(v) - 2A \cos(v) \sin(v) - 2C (\cos^2(v) - \sin^2(v)) \\
 &= A \sin(2v) - B \sin(2v) - 2C \cos(2v) \quad .
 \end{aligned}
 \tag{2.23}$$

Heraf fås, at $S'(v) = 0$ for

$$\tan(2v) = \frac{2C}{B-A} \quad , \quad (2.24)$$

således at netop når der ikke samtidig gælder, at $C = 0$ og $A = B$, så er der præcis to vinkler $v \in [0, \pi]$, som opfylder ligningen ovenfor, nemlig

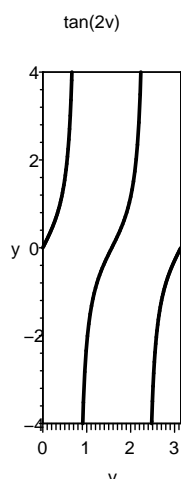
$$v = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2C}{B-A}\right) \quad (2.25)$$

og

$$v = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2C}{B-A}\right) \quad . \quad (2.26)$$

Bemærkning 2.8. Læg mærke til, at hvis $C = 0$, så er de to v -værdier stadig veldefinerede hvis $A = B$. Hvordan kan det lade sig gøre, når vi tydeligvis så dividerer med 0 i (2.25) og (2.26)?

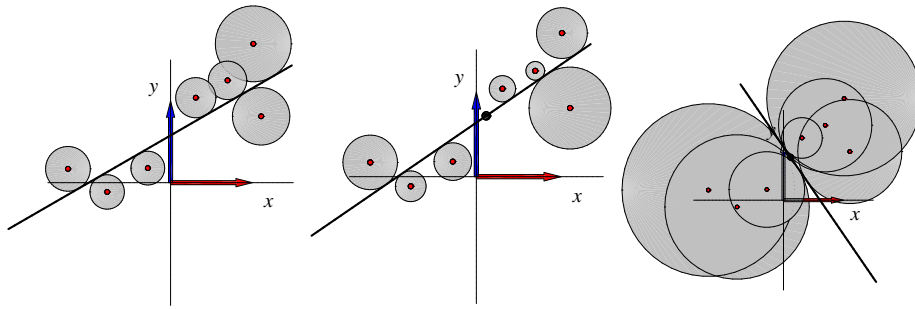
Hvis v tilhører intervallet fra 0 til π , så ligger $2v$ selvfølgelig i intervallet fra 0 til 2π så vi må afgøre hvilke værdier funktionen $\tan(2v)$ antager:



Figur 5: Funktionen $f(v) = \tan(2v)$ i intervallet $v \in [0, \pi]$. Bemærk, at for enhver værdi $y = q \in [-\infty, \infty]$ er der netop to værdier af $v \in [0, \pi]$, således at $\tan(2v) = q$.

Præcis én af v -værdierne i (2.25) og (2.26) svarer til den linje gennem massemidtpunktet som giver minimal S ; den anden vinkel svarer til den linje som giver *maksimal* S -værdi blandt alle linjerne gennem massemidtpunktet. Bemærk, at de to linjer står vinkelret på hinanden.

OPGAVE 2.9. Find de to linjer for de konkrete syv punkter i figur 2 og sammenlign med figur 6.



Figur 6: Til venstre: Den oprindelige linje-’approximation’ fra Figur 4 med $v = \pi/6 = 0.52$ og $c = 1/2$. I midten: Den bedste retlinede approksimation (med $v_0 = 0.60$ og $c_0 = 0.53$). Bemærk den signifikante forskel i ’fejl-arealerne’, selv om linje-koordinaterne c og v er næsten ens. Til højre: Den ’værste’ retlinede approksimation (med $v = 0.60 + \pi/2 = 2.17$ og $c = -0.50$) igennem massemidtpunktet.

Dermed har vi løst opgaven – faktisk for et vilkårligt antal punkter i planen. Løsningsproceduren er altså først at bestemme massemidtpunktet $\mathcal{P} = (\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y)$ og dernæst at finde de to løsninger til vinkel-problemet fra (2.25) og (2.26) og endelig vælge den vinkel v_0 , der giver mindst S -værdi. Så er løsningen, dvs. den bedste rette linje, simpelthen givet ved ligningen (2.19) med dette v_0 indsat i ligning (2.19):

$$L_{v_0} : (x - \mathcal{P}_x) \sin(v_0) - (y - \mathcal{P}_y) \cos(v_0) = 0 \quad . \quad (2.27)$$

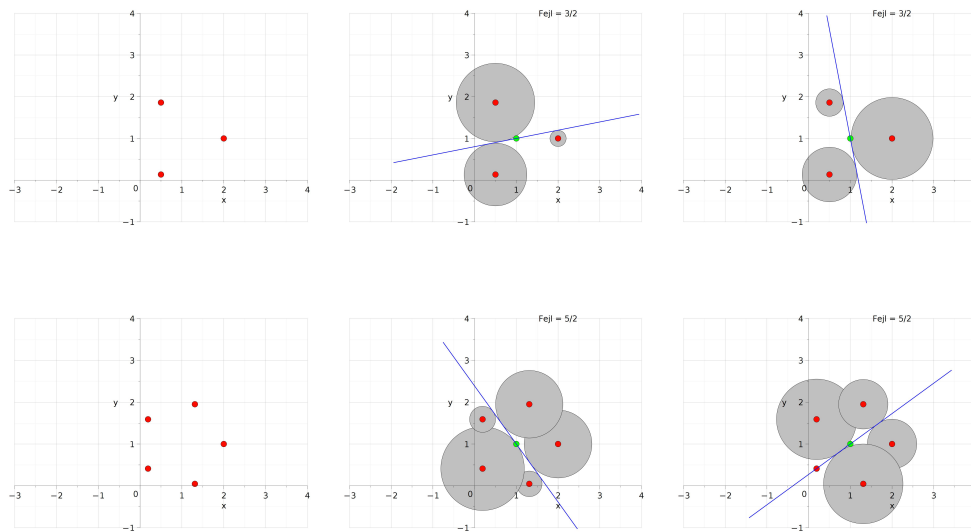
OPGAVE 2.10. Benyt fremgangsmåden til at finde den bedste rette linje L_{v_0} for 20 vilkårligt valgte punkter i planen og angiv fejlen.

Bemærkning 2.11. I ethvert konkret tilfælde – som i opgave 2.10 – kan fejlen $S(v_0)$ bestemmes ud fra de konkrete værdier for v_0 , A , B , og C via simpel indsættelse i ligning (2.22). Det betyder, at der i princippet også findes en helt generel formel for $S(v_0)$ udtrykt ved v_0 , A , B , og C . Vi angiver den ikke her fordi den er meget mere kompliceret end den formel, som vi vil udlede i afsnit 5 nedenfor ved hjælp af SVD metoden.

3 Intermezzo: Hvornår er $C = 0$ og $A = B$?

Hvis punkterne alle ligger i en hob, måske endda symmetrisk omkring massemidtpunktet, må vi forvente, at den bedste rette linje ikke er så veldefineret, altså at vi netop er i en situation hvor der næsten gælder: $C = 0$ og $A = B$, således at den brøk, der optræder på venstre side i (2.24) er ret usikker.

Lad os derfor – for eksperimentets skyld – undersøge, hvad der sker ved symmetriske konfigurationer med f.eks. 3 eller 5 punkter symmetrisk fordelt på en cirkel omkring? Så er $S(v)$ konstant for alle linjer, der roteres om massemidtpunktet, se figur 7.



Figur 7: Symmetriske konfigurationer med 3 og 5 punkter. Det totale cirkelskiveareal er i hvert af disse tilfælde konstant! Enhver ret linje igennem massemidtpunktet er samtidig bedst mulig og værst mulig!

OPGAVE 3.1. Mon det er sådan, at $C = 0$ og $A = B$ kun kan opnås med en symmetrisk placering af punkterne omkring massemidtpunktet, som antydnet i figur 7?

4 Centrering

Vi vil nu rekonstruere den fundne løsning ovenfor på en lidt simplere måde. Igen illustreret med de konkrete 7 punkter, som præsenteret ovenfor i ligning (2.2).

Vi flytter/parallelforskyder/centrerer punktmængden, sådan at det nye massemidtpunkt bliver $(0,0)$. Det gør vi ved at trække det allerede fundne massemidtpunkt \mathcal{P} fra alle punkterne p_i , $i = 1, \dots, 7$. De centrerede punkter har koordinaterne

$$q_i = p_i - \mathcal{P} = (x_i - \mathcal{P}_x, y_i - \mathcal{P}_y) \quad , \quad (4.1)$$

og det nye massemidtpunkt bliver så netop $Q = (0,0)$.

Vi vil så finde den bedste approksimation, den bedste rette linje, som approksimerer punkterne q_i , $i = 1, \dots, 7$.

OPGAVE 4.1. Forklar hvorfor og hvordan den linje derefter direkte kan bruges til rekonstruktion af den tidligere fundne bedste approksimation til de oprindelige datapunkter.

Datapunkterne for *den centrerede punktmængde*, som svarer til de 7 punkter, vi startede med i (2.2), er her samlet i en (2×7) matrix, hvor søjlerne er de centrerede punkters koordinater:

$$M = \begin{bmatrix} -0.39 & 0.19 & 0.58 & -1.37 & -0.89 & 0.99 & 0.89 \\ -0.54 & 0.32 & 0.53 & -0.55 & -0.83 & 0.09 & 0.98 \end{bmatrix} . \quad (4.2)$$

Vi gentager proceduren fra afsnit 2 – men nu med de meget simple udtryk, som stammer fra centreringsen $Q = (0,0)$:

$$\begin{aligned} c &= 0 \\ S(v) &= A \cos^2(v) + B \sin^2(v) - 2C \cos(v) \sin(v) \\ A &= \sum_{i=1}^7 y_i^2 \\ B &= \sum_{i=1}^7 x_i^2 \\ C &= \sum_{i=1}^7 x_i \cdot y_i \\ L_v : x \sin(v) - y \cos(v) &= 0 \quad , \end{aligned} \quad (4.3)$$

idet vi her nu også tillader os at bruge betegnelserne (x_i, y_i) for koordinaterne for q_i . Opgaven er så også her blot at bestemme den relevante værdi af v_0 som giver $S'(v_0) = 0$ og indsætte i L_{v_0} .

OPGAVE 4.2. Bestem v_0 for de centrerede datapunkter som er repræsenteret i matricen M i (4.2) ovenfor; bestem den resulterende bedste linje L_{v_0} (nu igennem $(0,0)$); og sammenlign med resultatet ovenfor for de oprindelige 7 punkter.

4.1 Inertimoment-matricen

Bemærk, at matricen med elementerne A , B og C for de centrerede data i (4.3)

$$\text{Im} = \begin{bmatrix} A & -C \\ -C & B \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

er symmetrisk og (sædvanligvis) positiv definit, og at $S(v)$ stadig kan skrives som matrix-produktet:

$$S(v) = \begin{bmatrix} \cos(v) & \sin(v) \end{bmatrix} \cdot \text{Im} \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} . \quad (4.5)$$

OPGAVE 4.3. Bevis, at Im er positiv definit medmindre alle punkterne q_i ligger på en ret linje. Vink: $S(v) \geq 0$ for alle v .

Definition 4.4. *Matricen I_m kaldes inerti-moment-matricen for punktmængden med hensyn til det givne (x,y) -koordinatsystem.*

Matricen I_m optræder igen i det næste afsnit, hvor vi tolker $S'(v) = 0$ og finder v_0 ved hjælp af SVD for data-matricen M .

5 SVD alternativet

5.1 Dekomponering

Den centrerede data-matrix M kan – ligesom alle andre (2×7) -matricer og alle $(m \times n)$ -matricer – dekomponeres til SVD formen:

$$M = U \cdot \Sigma \cdot V^T, \quad (5.1)$$

hvor så U er en (2×2) -matrix, Σ er en (2×7) -'diagonalmatrix', og V^* er en (7×7) -matrix med følgende udseende for passende værdier af θ og $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq 0$:

$$\begin{aligned}
 U &= \begin{bmatrix} | & | \\ u_1 & u_2 \\ | & | \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \\
 V^T &= \begin{bmatrix} - - v_1 - - \\ - - v_2 - - \\ - - v_3 - - \\ - - v_4 - - \\ - - v_5 - - \\ - - v_6 - - \\ - - v_7 - - \end{bmatrix} \\
 \Sigma &= \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.
 \end{aligned} \quad (5.2)$$

Søjlevektorerne u_k , $k = 1, 2$, i U er udtrykt simpelt ved den ene vinkel θ . Søjlevektorerne er enhedsvektorer og de står vinkelret på hinanden (prikproduktet er 0). Rækkevektorerne v_ℓ , $\ell = 1, \dots, 7$, i matricen V^T er også enhedsvektorer (i \mathbb{R}^7 med 7 koordinater i hver vektor) som er parvis vinkelrette på hinanden (med hensyn til det naturlige prikprodukt i \mathbb{R}^7).

OPGAVE 5.1. Benyt en SVD-'maskine' (Python, Maple, Mathematica, eller et andet program) til at bestemme de eksplicitte matricer U , Σ , og V for den givne konkrete matrix M med de centrerede datapunkter fra (4.2).

5.2 $M \cdot M^\top$ og Inertimoment-matricen

OPGAVE 5.2. Vis helt generelt – ved at bruge (5.2) og passende matrixproduktformler – at:

$$M \cdot M^\top = U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \cdot U^\top . \quad (5.3)$$

Definition 5.3. Sporet af en kvadratformet matrix F er defineret ved at være summen af diagonalelementerne f_{ii} i F :

$$\text{spor}(F) = \sum_i f_{ii} . \quad (5.4)$$

OPGAVE 5.4. Vis, ved en udregning af højresiden i 5.3, at

$$\text{spor}(M \cdot M^\top) = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 , \quad (5.5)$$

så det aktuelle spor er helt uafhængig af θ !

OPGAVE 5.5. Vis helt generelt, at $M \cdot M^\top$ desuden kan udtrykkes ved inertimomentmatricens elementer således – og bemærk forskellen imellem denne matrix og inertimomentmatricen:

$$M \cdot M^\top = \begin{bmatrix} B & C \\ C & A \end{bmatrix} . \quad (5.6)$$

Det giver to konsekvenser:

$$\text{spor}(M \cdot M^\top) = B + A = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 \quad (5.7)$$

og derfor også:

$$\begin{aligned} \text{Im} &= \begin{bmatrix} A & -C \\ -C & B \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B+A & 0 \\ 0 & B+A \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} B & C \\ C & A \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B+A & 0 \\ 0 & B+A \end{bmatrix} - M \cdot M^\top \\ &= \begin{bmatrix} \sigma_1^2 + \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 + \sigma_2^2 \end{bmatrix} - U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \cdot U^\top \\ &= U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 \end{bmatrix} \cdot U^\top \end{aligned} \quad (5.8)$$

Bemærk, at σ_1^2 og σ_2^2 blot har byttet plads i forhold til deres placering i ligning (5.3)!

OPGAVE 5.6. Hvordan fås det sidste udtryk ovenfor i (5.8)?

5.3 Det generelle problem og SVD-løsningen

Vi vender nu tilbage til det oprindelige generelle problem, som vi allerede har studeret – og løst i konkrete tilfælde – ovenfor:

Problem 5.7. Givet n punkter i planen med centreret data-matrix M . Hvilken ret linje L_{v_0} igennem $(0,0)$ approksimerer punkterne bedst muligt, og hvor stor er den tilhørende mindste fejl $S(v_0)$?

Med SVD af M som udtrykt i ligning (5.1) får vi løsningen til problemet serveret på et sølvfad:

Sætning 5.8. Lad θ , σ_1 , σ_2 , og U betegne 'output'-elementer fra SVD af den centrerede data-matrix M . Den ønskede rette linje, som approksimerer data-punkterne i M bedst muligt, er så $L_\theta : x \sin(\theta) - y \cos(\theta) = 0$ med retningsvektoren $u_1 = (\cos(\theta), \sin(\theta))$. Inertimoment-fejlen ved at bruge den linje er σ_2^2 . Den rette linje igennem $(0,0)$ som approksimerer data-punkterne værst muligt er tilsvarende $L_{\theta+\pi/2} : x \cos(\theta) + y \sin(\theta) = 0$ med retningsvektoren $u_2 = (-\sin(\theta), \cos(\theta))$, og fejlen ved at bruge den linje er σ_1^2 .

Bevis. Vi skal finde mindsteværdien af $S(v)$ og den værdi v_0 for hvilken mindsteværdien $S(v_0)$ antages. Vi bruger (4.5) sammen med det sidste udtryk for Im i ligning (5.8):

$$\begin{aligned} S(v) &= \begin{bmatrix} \cos(v) & \sin(v) \end{bmatrix} \cdot \text{Im} \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(v) & \sin(v) \end{bmatrix} \cdot \left(U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 \end{bmatrix} \cdot U^\top \right) \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} \\ &= \left(\begin{bmatrix} \cos(v) & \sin(v) \end{bmatrix} \cdot U \right) \cdot \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 \end{bmatrix} \cdot \left(U^\top \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} \right) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Vi kan udtrykke den sidste faktor som en vektor:

$$\begin{aligned} \left(U^\top \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} \right) &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(v) \\ \sin(v) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(v - \theta) \\ \sin(v - \theta) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Her har vi brugt additionsformlerne for cosinus og sinus, se [Wikipedia](#):

$$\begin{aligned} \cos(v - \theta) &= \cos(v) \cdot \cos(\theta) + \sin(v) \cdot \sin(\theta) \\ \sin(v - \theta) &= \sin(v) \cdot \cos(\theta) - \cos(v) \cdot \sin(\theta) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Så er tilsvarende den første faktor i det sidste udtryk i ligning (5.9):

$$\left(\begin{bmatrix} \sin(v) & \cos(v) \end{bmatrix} \cdot U \right) = \begin{bmatrix} \cos(v - \theta) & \sin(v - \theta) \end{bmatrix} \quad , \quad (5.12)$$

og dermed – hvis vi et øjeblik omdøber $(v - \theta)$ til ϕ :

$$S(v) = \begin{bmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & \sigma_1^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos(\phi) \\ \sin(\phi) \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

$$= \cos^2(\phi) \cdot \sigma_2^2 + \sin^2(\phi) \cdot \sigma_1^2 \quad .$$

På dette sted må vi huske på, at θ er en fast værdi, som er bestemt ud fra SVD af den givne data-matrix. Når vi varierer v med henblik på at gøre $S(v)$ mindst muligt svarer det til at variere ϕ i ligning (5.13).

Påstand: Det følger af den ligning, at $S(v)$ er mindst når $\phi = 0$, dvs. når $v = \theta$, og det følger, at den mindste værdi for $S(v)$ er σ_2^2 . Det følger også af ligningen, at $S(v)$ er størst når $\phi = \pi/2$, dvs. når $v = \theta + \pi/2$, og det følger, at den største værdi for $S(v)$ er σ_1^2 . Se opgave 5.9 nedenfor.

Dermed har vi fundet den søgte vinkel, $v_0 = \theta$. Den ønskede rette linje, som approkserer de centrerede data-punkter bedst muligt, er derfor $L_\theta : x \sin(\theta) - y \cos(\theta) = 0$ med retningsvektoren $(\cos(\theta), \sin(\theta))$. Inertimoment-fejlen ved at bruge den linje er σ_2^2 . Den rette linje igennem $(0,0)$ som approkserer data-punkterne værst muligt er tilsvarende $L_{\theta+\pi/2} : x \cos(\theta) + y \sin(\theta) = 0$, og fejlen ved at bruge den linje er σ_1^2 . Og det var det, vi skulle bevise. □

OPGAVE 5.9. Vis, at påstanden i beviset ovenfor er korrekt: [Det følger af ligning (5.13), at $S(v)$ er mindst når $\phi = 0$, dvs. når $v = \theta$, og det følger, at den mindste værdi for $S(v)$ er σ_2^2 . Det følger også af ligningen, at $S(v)$ er størst når $\phi = \pi/2$, dvs. når $v = \theta + \pi/2$, og det følger, at den største værdi for $S(v)$ er σ_1^2].

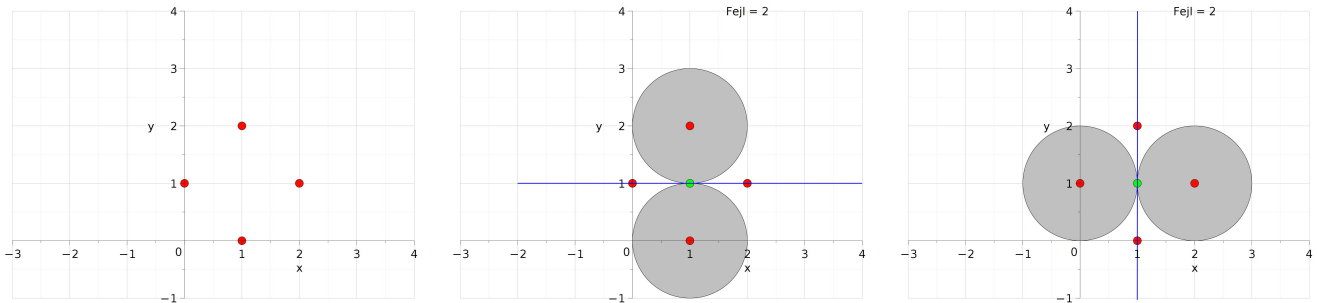
OPGAVE 5.10. Find på den måde igen, nu ved hjælp af SVD analyse som ovenfor, de to linjer, den bedste og den dårligste, igennem massemidtpunktet for den angivne punktmængde i 2.2 og sammenlign med resultatet af opgave 2.9.

6 Flere eksempler

Her er et par eksempler på forskellige data-sæt i planen med tilhørende bedste – og værste – approkserende rette linjer. De er konstruerede ved hjælp af Maple-arket [6], som også kan benyttes til eksperimenter med alle mulig andre punktsamlinger i planen.

6.1 PCA for punktmængder i 2D

Fremstillingen ovenfor har faktisk resulteret i en såkaldt PCA (Principal Component Analysis) af de givne punktmængder i planen:



Figur 8: En simpel symmetrisk konfiguration med fire punkter. Alle rette linje igennem massemidtpunktet giver samme fejl – ligesom i figur 7.

Definition 6.1. De principale komponenter af en punktmængde i 2D består af:

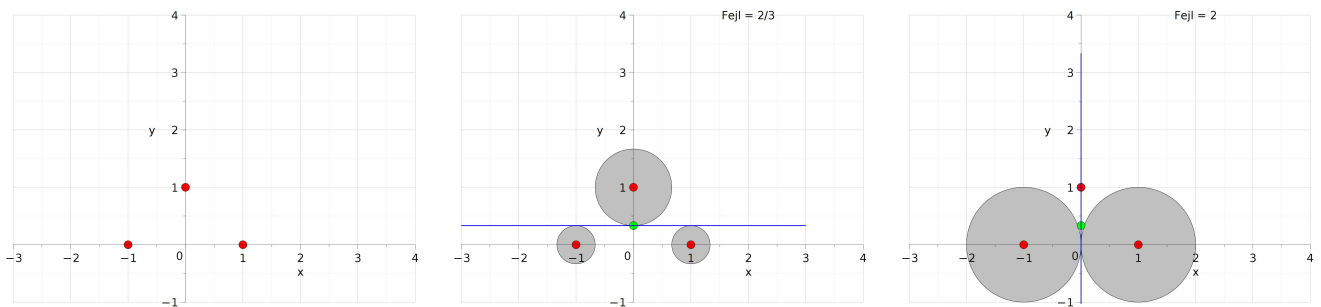
1. Punktmængdens massemidtpunkt \mathcal{P} .
2. Den bedste rette linje igennem \mathcal{P} med retningsvektor u_1 og fejl σ_2^2 (med referencer til output fra SVD af datamatricen for punktmængden). Denne rette linje kaldes punktmængdens første principale akse.
3. Den værste rette linje igennem \mathcal{P} med retningsvektor u_2 og fejl $\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq 0$ (stadig med referencer til output fra SVD af datamatricen for punktmængden). Denne rette linje kaldes punktmængdens anden principale akse.

NB: Som eksemplificeret ovenfor kan det forekomme (eksempelvis for symmetriske punktkonfigurationer), at $\sigma_1 = \sigma_2$. I de tilfælde er alle rette linjer igennem massemidtpunktet lige gode – enhver akse er både første- og anden-principale akse.

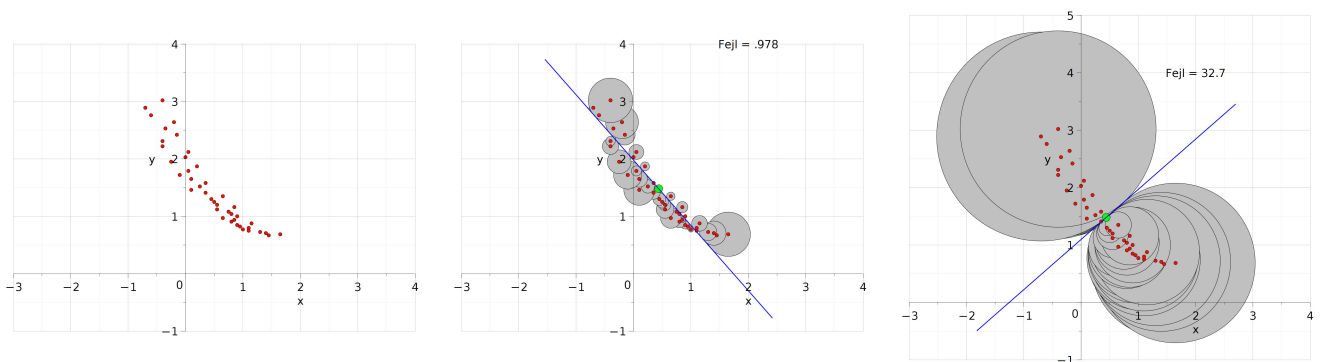
6.2 Projektioner på de principale akser

Det er nu rimelig oplagt, at vi kan illustrere spredningen (variansen) af punktmængderne i de principale akseretninger ved at projicere punktmængderne vinkelret på de to principale akser. Dermed får vi to én-dimensionale repræsentationer af punktmængderne, som hver for sig giver 'skygge'-informationer om punktmængdens fordeling i planen.

OPGAVE 6.2. I Opgaverne 2.9 og 5.10 har vi på forskellige måder fundet de principale akser for den oprindelige 7-punktsmængde som givet i (2.2). Bestem de vinkelrette projektioner på hver af de principale akser for 7-punktsmængden. Vink: Givet en ret linje, som går igennem punktet (x_0, y_0) og som har enheds-retningsvektoren e , så er projektionen af et vilkårligt punkt (x, y) vinkelret ind på linjen givet ved projektiøns-punktet $(x_0, y_0) + (e \bullet (x, y)) \cdot e$, hvor \bullet betegner det sædvanlige prikprodukt/skalarprodukt.



Figur 9: En simpel konfiguration med tre punkter. Bemærk, at den værste rette linje igennem massemidpunktet er den lodrette.

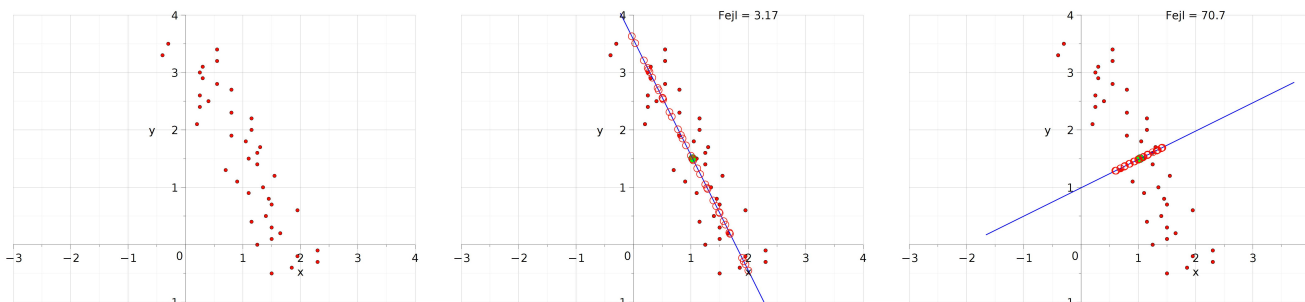


Figur 10: Punkter langs/omkring grafen for en eksponentielt aftagende funktion.

Projektionerne på første principale akse er typisk spredt ud langs akse, mens projektionerne på anden principale akse typisk er klumpet sammen. Her er nogle andre eksempler, som illustrerer dette:

OPGAVE 6.3. Overvej bemærkningen i underteksten til figur 12: Hvordan kan en sådan rekonstruktion foretages hvis det oplyses hvilke projektionspunkter, der stammer fra samme punkt i planen?

OPGAVE 6.4. Vis, at massemidpunktet af en punktmængde bevares ved vinkelret projektion på en ret linje.



Figur 11: Punktkonfiguration med projektioner på de principale akser.

7 SVD som projektions-operator i planen

Her er en super-simpel direkte metode til at finde en punktmængdes projektioner på de principale akser med SVD til rådighed:

Sætning 7.1. *Lad M betegne den centrerede data-matrix for en punktmængde i planen, og lad $M = U \cdot \Sigma \cdot V^T$ betegne SVD af M , hvor vi har fra (5.2) (her igen kun angivet i tilfældet med 7 punkter):*

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (7.1)$$

Vi definerer nu en ny Σ -matrix, som afhænger af to parametre, ϵ_1 og ϵ_2 :

$$\widehat{\Sigma}(\epsilon_1, \epsilon_2) = \begin{bmatrix} \sigma_1 \cdot \epsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \cdot \epsilon_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (7.2)$$

Så er den centrerede data-matrix for de projicerede punkter på den første principale akse givet ved:

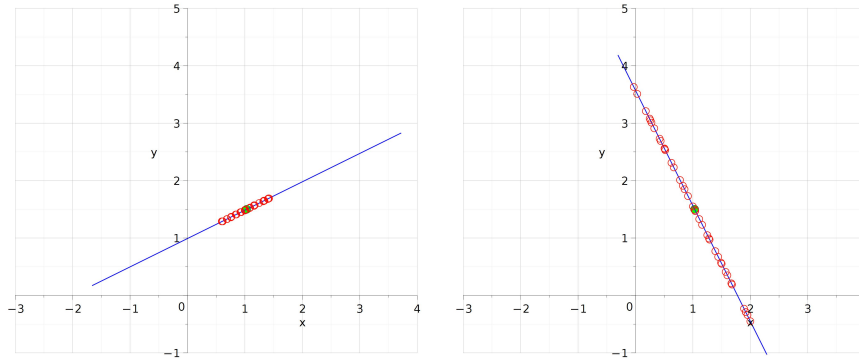
$$M_1 = U \cdot \widehat{\Sigma}(1, 0) \cdot V^T , \quad (7.3)$$

og den centrerede data-matrix for projektionerne på den anden principale akse:

$$M_2 = U \cdot \widehat{\Sigma}(0, 1) \cdot V^T . \quad (7.4)$$

Bevis. Vi ser kun på konstruktionen af M_1 . Konstruktionen af M_2 fås på helt tilsvarende måde. Søjlerne i M , altså $p_i = (x_i, y_i)$ er de punkter der skal projiceres på den første principale akse med retningsvektoren $e = u_1$. Vi har så – ligesom i vinket i Opgave 6.2 – at projektionen af p_i kan udtrykkes således:

$$Pp_i = (e \bullet p_i) \cdot e . \quad (7.5)$$



Figur 12: De rene PCA projektioner af punkterne i eksemplet ovenfor. Bemærk, at den oprindelige punktconfiguration i planen kan rekonstrueres ud fra disse principale projektioner hvis ethvert projektiionspunkt i begge projektioner er nummereret efter deres originale 'ophavspunkt' i planen.

Faktoren på e fås derfor via den i 'te søjle $M[i]$ i M :

$$e \bullet p_i = e \cdot p_i^\top = e \cdot M[i] \quad . \quad (7.6)$$

Alle faktorerne på e og dermed alle projektiionerne fås nu ud fra:

$$e \cdot M = e \cdot U \cdot \Sigma \cdot V^\top = [1 \ 0] \cdot \Sigma \cdot V^\top \quad (7.7)$$

fordi $e = u_1$ netop er første søjle i U , har længden 1, og er ortogonal på anden søjle u_2 i U . Men her er (illustreret igen for kun 7 punkter):

$$[1 \ 0] \cdot \Sigma \cdot V^\top = [\sigma_1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0] \cdot V^\top = \sigma_1 \cdot v_1 \quad , \quad (7.8)$$

hvor v_1 er første søjle i matricen V ! Det er præcis de samme faktorer på $e^\top = u_1^\top$ som optræder i produktet

$$U \cdot \widehat{\Sigma}(1,0,0) \cdot V^\top = U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot V^\top \quad , \quad (7.9)$$

og det var det vi skulle vise. □

OPGAVE 7.2. Vis helt konkret – som en verifikation af sætningen – at M_1 og M_2 for den *centrerede* 7-punktsmængde fra (4.2) er de samme projektiions-mængder på de principale akser som fundet i Opgave 6.2 – på nær centreringen.

OPGAVE 7.3. Inde i beviset for sætning 7.1 blev det fremhævet, at koordinaterne $\sigma_1 \cdot v_1$ er de faktorer, som $e = u_1$ skal ganges med for at få de ønskede projektiionspunkter på den første principale akse. Illustrér i forlængelse af opgave 7.2 at det virkelig forholder sig sådan.

8 Videregående overvejelser

Et naturligt spørgsmål er nu at finde den bedste approksimation til punktmængder i 3 dimensioner – enten med en ret linje eller med en plan – og tilsvarende finde udtryk for de tilhørende fejl. De spørgsmål kan helt generelt besvares med PCA (Principal Component analyse) af vilkårlige punktmængder i N dimensioner, se [7]. Inertimomentmatricer og SVD kan tilsvarende benyttes til PCA i de højere dimensioner, og metoden kan desuden udvides til PCA for vægtede områder i de aktuelle dimensioner. Groft sagt går den udvidelse ud på at erstatte de summer, vi har set i aktion ovenfor i 2D, med tilsvarende integraler af passende kombinationer af vægt-funktionerne over de givne områder. Inertimomentmatricerne for vægtede områder i plan og rum studeres blandt andet i [4, 5].

8.1 Punktmængder i 3D

Vi vil her nøjes med at antyde, hvordan en PCA analyse, helt tilsvarende den vi har udfoldet ovenfor i planen, kan foretages med SVD for punktmængder i rummet. Og samtidig vise, hvordan fejlen, altså summen af kvadratafstandene til en linje, igen kan udtrykkes og dermed minimeres via en undersøgelse af inertimoment-matricen for punktmængden.

I 3D må vi forvente, at der optræder 3 principale akser, hver med deres respektive mål for den fejl, der begås ved at approksimere en given punktmængde med de akser. Heraf følger så, at der dels opstår interessante projektioner på akserne ligesom ovenfor, men også interessante projektioner på hver af de 3 *planer*, der udspændes af hvert valg af par af principale akser.

Udgangspunktet er selvfølgelig en given punktmængde med n punkter, nu i rummet, med en tilhørende data-matrix, som nu er en $(3 \times n)$ -matrix. Når vi igen centrerer punktmængden ved at trække massemidtpunktet fra alle koordinaterne får vi en centreret $(3 \times n)$ -datamatrix, som vi igen vil kalde M .

Vi har selvfølgelig også brug for at betragte alle de rette linjer (igennem det centrerede massemidtpunkt $(0,0,0)$). Enhver sådan linje er givet ved en enheds-retningsvektor i rummet $e = (e_1, e_2, e_3)$. Dem er der lige så mange af som der er punkter på en kugleflade. Parameterfremstillingen for den tilhørende linje er ret simpel:

$$L_e : \gamma(t) = t \cdot e \quad , \quad t \in]-\infty, \infty[\quad . \quad (8.1)$$

Lad nu $p = (x, y, z)$ betegne et vilkårligt punkt i rummet. Så kan kvadrat-afstanden fra p til L_e udtrykkes ved

$$r^2(p, L_e) = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y^2 + z^2 & -x \cdot y & -x \cdot z \\ -y \cdot x & x^2 + z^2 & -y \cdot z \\ -z \cdot x & -z \cdot y & x^2 + y^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} \quad . \quad (8.2)$$

OPGAVE 8.1. Bevis formelen i (8.2). Kig evt i [4, Afsnit 8.3].

Dermed er summen $S(e)$ af kvadrat-afstandene fra punkterne i punktmængden $\{p_1, \dots, p_n\}$ til L_e , hvor vi betegner de tre koordinater for punktet således: $p_i = (x_i, y_i, z_i)$:

$$\begin{aligned} S(e) &= \sum_{i=1}^{i=n} r^2(p_i, L_e) \\ &= [e_1 \quad e_2 \quad e_3] \cdot \begin{bmatrix} \sum_i (x_i^2 + z_i^2) & -\sum_i x_i \cdot y_i & -\sum_i x_i \cdot z_i \\ -\sum_i y_i \cdot x_i & \sum_i (x_i^2 + z_i^2) & -\sum_i y_i \cdot z_i \\ -\sum_i z_i \cdot x_i & -\sum_i z_i \cdot y_i & \sum_i (x_i^2 + y_i^2) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (8.3)$$

Opgaven er nu den samme som før, nemlig at finde e således at fejlen $S(e)$ er mindst mulig.

8.2 Linje-approksimationer i 3D; den bedste, den dårligste, og den mellemgode

Matricen i udtrykket (8.3) vil vi selvfølgelig (igen) kalde inertimomentmatricen, Im , for punktmængden:

$$S(e) = \sum_{i=1}^{i=n} r^2(p^i, L_e) = [e_1 \quad e_2 \quad e_3] \cdot \text{Im} \cdot \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix}, \quad (8.4)$$

og den er (igen, ligesom i ligning (5.8)) relateret direkte til SVD data for M som følger, og med samme udregninger og begrundelse som i (5.8):

$$\text{Im} = U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_3^2 + \sigma_2^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_3^2 + \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2^2 + \sigma_1^2 \end{bmatrix} \cdot U^T, \quad (8.5)$$

hvor U og $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \geq 0$ som nævnt stammer fra SVD dekomponeringen af M , ligesom i ligning (5.1).

Så er

$$S(e) = [e_1 \quad e_2 \quad e_3] \cdot U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_3^2 + \sigma_2^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_3^2 + \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_2^2 + \sigma_1^2 \end{bmatrix} \cdot U^T \cdot \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix}, \quad (8.6)$$

som er mindst – med værdien σ_3 – for

$$U^T \cdot \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \text{ i.e. ækvivalent med } [e_1 \quad e_2 \quad e_3] \cdot U = [1 \quad 0 \quad 0], \quad (8.7)$$

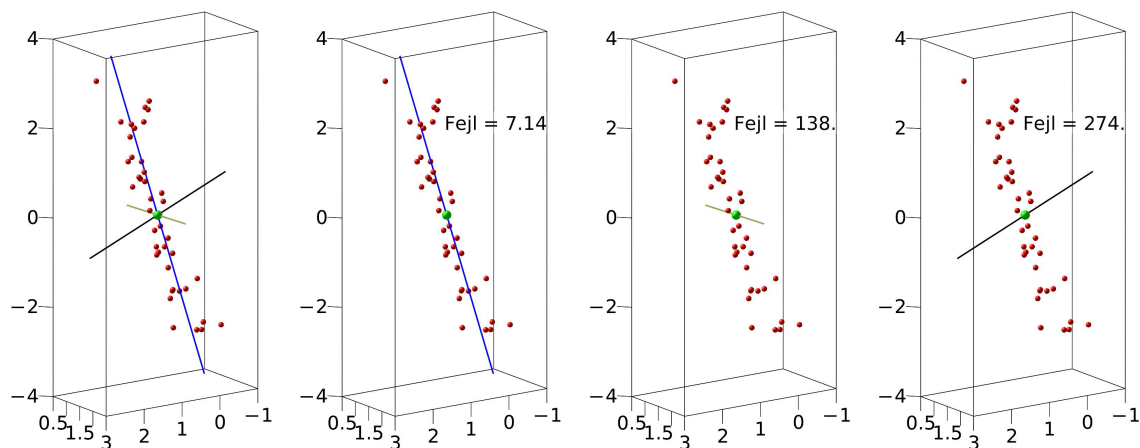
hvilket opnås når e er den første række i U^\top , altså netop når $e = u_1$ (eller $e = -u_1$).

Vi har dermed fundet en retningsvektor u_1 for den første principale akse i PCA for punktmængden med centreret datamatrix M , og fejlen ved at approksimere punktmængden med den akse er $\sigma_3^2 + \sigma_2^2$.

Tilsvarende aflæses på samme måde, at en retningsvektor for den sidste principale akse er u_3 (vinkelret på u_1), og den tilhørende fejlværdi er den størst mulige værdi, $\sigma_1^2 + \sigma_2^2$. 'Mellempfejlen' $\sigma_1^2 + \sigma_3^2$ fås endelig ved brug af u_2 -retningsvektoren (som pr. SVD dekomponeringen er vinkelret på både u_1 og u_3).

Med andre ord: De principale akseretninger er givet ved søjlevektorerne i U og de respektive fejl er simple summer af kvadrater af σ -værdierne.

Det er igen en rimelig simpel sag at illustrere disse resultater (i rummet) og dermed forhåbentlig gøre dem intuitivt mere tilgængelige:

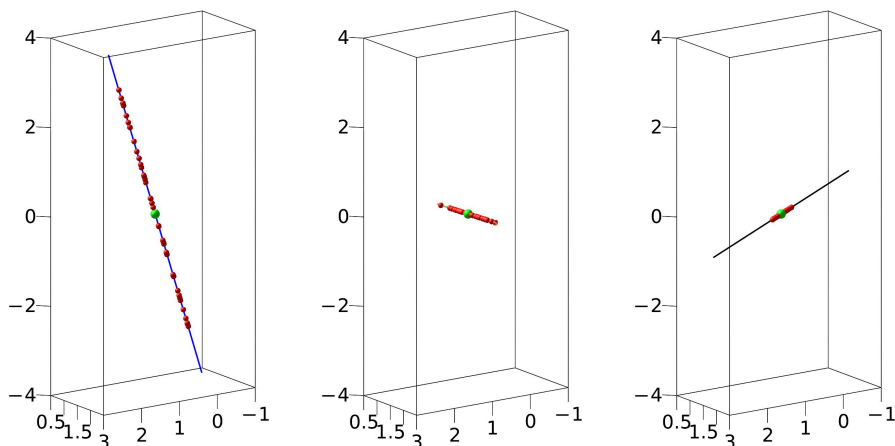


Figur 13: En punktmængde og de parvis ortogonale principale akser igennem massemidtpunktet. Akse-retningerne er udtrykt fra U -matricen i SVD af den centrerede data-matrix M . Her er også markeret de fejl der opnås ved approksimation af punktmængden med de respektive principale akser. Fejlværdierne er som fundet ovenfor udtrykt ved henholdsvis $\sigma_3^2 + \sigma_2^2$, $\sigma_1^2 + \sigma_3^2$, og $\sigma_1^2 + \sigma_2^2$ i voksende rækkefølge.

OPGAVE 8.2. Samme som opgave 6.3 ovenfor, men nu i 3D og med 3 akse-projektioner.

8.3 Plan-approksimationer i 3D; den bedste, den dårligste, og den mellemgode

Til sidst vil vi undersøge det helt naturlige spørgsmål: PCA-analysen af en given punktmængde giver – ligesom ovenfor – typisk anledning til tre parvis ortogonale principale akser igennem



Figur 14: Projektionerne af punktmængden fra figur 13 på de respektive principale akser for punktmængden. Bemærk hvordan tætheden af projektiionspunkterne vokser med de tilsvarende fejlværdier fra figur 13.

massemidtpunktet for punktmængden. Hvert par af disse akser udspænder en plan. Der er altså 3 PCA-planer, som i sig selv naturligvis approksimerer punktmængden mere eller mindre godt. Men er der én af de planer, som er den bedst approksimerende plan blandt alle planer igennem massemidtpunktet? Svaret er – måske ikke så overraskende:

Sætning 8.3. *Lad en centreret punktmængde med n punkter i rummet være givet ved $(3 \times n)$ -data-matricen M med singulære værdier $\sigma_1 \geq \sigma_2 > \sigma_3$ og principale akseretninger givet ved søjlerne i den tilhørende U -matrix. Den plan i rummet som bedst approksimerer punktmængden er planen udspændt af de to første principale akser (med enheds-normalvektoren u_3) og tilhørende fejl $S = \sigma_3^2$.*

Bevis. Vi ser på planen Π igennem $(0, 0, 0)$, som har enhedsnormalvektor $\mu = \mu_1, \mu_2, \mu_3$ og har brug for et udtryk for kvadratet på afstanden fra et punkt $p = (x, y, z)$ til Π :

$$r^2(p, \Pi) = \begin{bmatrix} \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x^2 & x_i \cdot y & x \cdot z \\ y \cdot x & y^2 & y \cdot z \\ z \cdot x & z \cdot y & z^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix} . \quad (8.8)$$

OPGAVE 8.4. Bevis formelen i ligning (8.8). Kig evt. i [4, Afsnit 9.1].

Fejlen $S(\mu)$ ved brug af approksimation med Π er så – med $p_i = (x_i, y_i, z_i)$:

$$\begin{aligned}
 S(\mu) &= \sum_{i=1}^{i=n} r^2(p_i, \Pi) \\
 &= [\mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3] \cdot \begin{bmatrix} x_i^2 & x_i \cdot y_i & x_i \cdot z_i \\ y_i \cdot x_i & y_i^2 & y_i \cdot z_i \\ z_i \cdot x_i & z_i \cdot y_i & z_i^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix} \\
 &= [\mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3] \cdot M \cdot M^\top \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix} .
 \end{aligned} \tag{8.9}$$

OPGAVE 8.5. Bevis, at det lige præcis er $M \cdot M^\top$, der optræder som midtermatrix i produktet ovenfor i (8.9).

Vi bruger selvfølgelig nu igen SVD omskrivningen/faktoreringen af M og opnår det simple udtryk for $S(\mu)$:

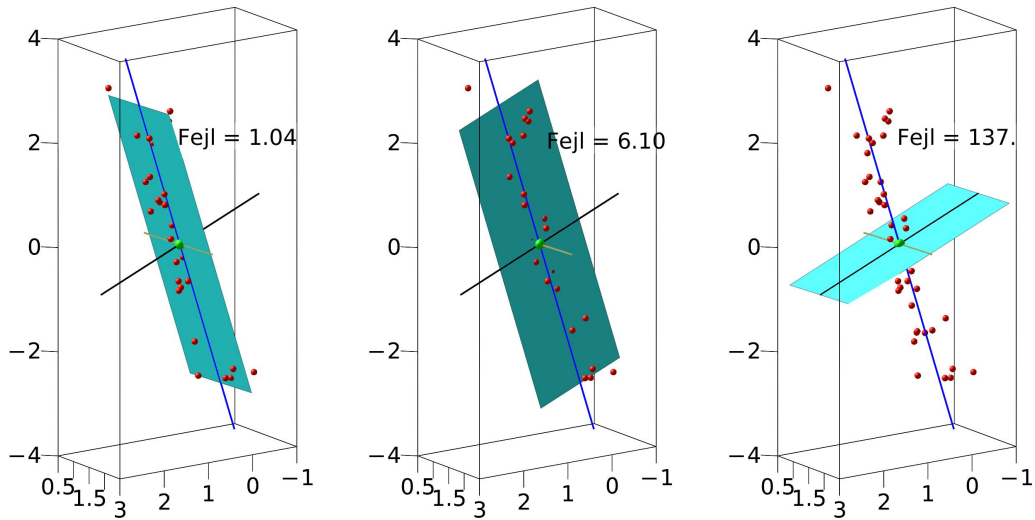
$$\begin{aligned}
 S(\mu) &= \sum_{i=1}^{i=n} r^2(p_i, \Pi) \\
 &= [\mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3] \cdot M \cdot M^\top \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix} \\
 &= [\mu_1 \quad \mu_2 \quad \mu_3] \cdot U \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3^2 \end{bmatrix} \cdot U^\top \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{bmatrix} .
 \end{aligned} \tag{8.10}$$

Heraf aflæser vi nu, at $S(\mu)$ er mindst, nemlig σ_3^2 , for $\mu = u_3$, altså for den plan, der er udspændt af de to første principale akser. Og at $S(\mu)$ er størst, σ_1^2 , for $\mu = u_1$, altså for den plan, der er udspændt af de to sidste principale akser i PCA analysen af M . Og det var det, vi skulle bevise. \square

I figurerne 15 og 16 ses illustrationer af indholdet af sætning 8.3 for den konkrete punktmængde i figurerne 13–14 ovenfor. Opstillingen/rækkefølgen følger samme opstilling som for linje-approksimationerne.

9 SVD som projektions-operator i rummet

Ligesom i planen giver SVD en direkte metode til projektion af rumlige punktmængder ikke blot på de 3 principale akser, men også på de 3 planer, som udspændes af de principale akser:



Figur 15: Fejlmålene ved planapproximationer efter par af PCA-principale akser.

Sætning 9.1. Lad M betegne den centrerede data-matrix for en punktmængde i rummet, og lad $M = U \cdot \Sigma \cdot V^T$ betegne SVD af M , hvor vi har fra (5.2) (her igen kun angivet i form af 7 punkter i rummet):

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (9.1)$$

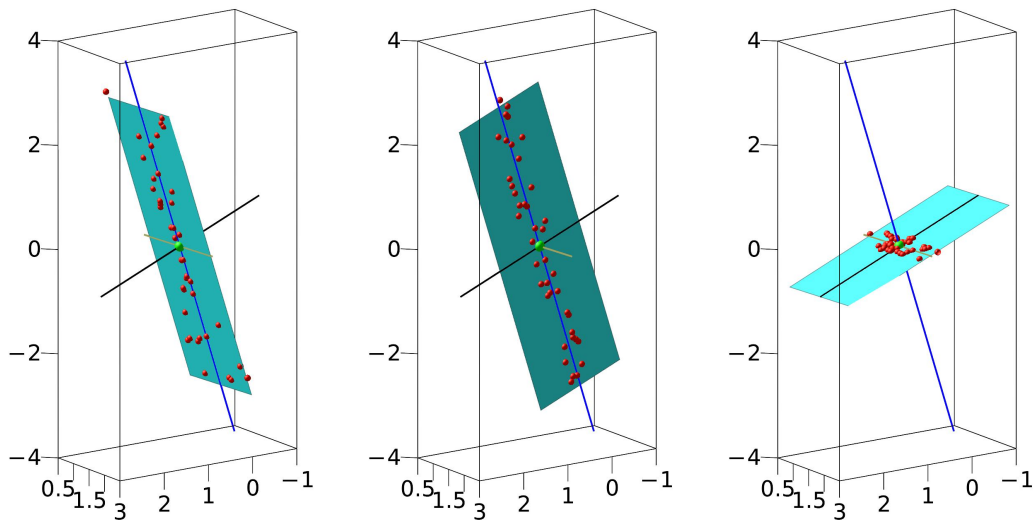
Vi definerer ligesom for punktmængderne i planen en ny Σ -matrix, som nu afhænger af 3 parametre, ε_1 , ε_2 og ε_3 :

$$\widehat{\Sigma}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \begin{bmatrix} \sigma_1 \cdot \varepsilon_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \cdot \varepsilon_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \cdot \varepsilon_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (9.2)$$

Så er de centrerede data-matricer for de projicerede punkter på de principale akser givet ved henholdsvis

$$\begin{aligned} M_1 &= U \cdot \widehat{\Sigma}(1, 0, 0) \cdot V^T \\ M_2 &= U \cdot \widehat{\Sigma}(0, 1, 0) \cdot V^T \\ M_3 &= U \cdot \widehat{\Sigma}(0, 0, 1) \cdot V^T . \end{aligned} \quad (9.3)$$

Og de centrerede data-matricer for projektionerne på de tre planer udspændt af par af principale akser er tilsvarende (hvor M_{23} betegner matricen for projektionen på anden og tredje principale akser, osv.):



Figur 16: Projektionerne af de givne punkter på PCA-planerne i figur 15.

$$\begin{aligned}
 M_{23} &= U \cdot \widehat{\Sigma}(0, 1, 1) \cdot V^T \\
 M_{13} &= U \cdot \widehat{\Sigma}(1, 0, 1) \cdot V^T \\
 M_{12} &= U \cdot \widehat{\Sigma}(1, 1, 0) \cdot V^T .
 \end{aligned}
 \tag{9.4}$$

Bevis. Beviset er kun lidt mere kompliceret end beviset for sætning 7.1, men følger i øvrigt samme strategi, og overlades derfor til opgave 9.2 nedenfor. □

OPGAVE 9.2. Bevis sætning 9.1 i alle detaljer – evt. ved at følge strategien fra beviset for sætning 7.1.

OPGAVE 9.3. Benyt sætningen til at konstruere PCA projektioner af selvvalgte punktmængder i rummet – på samme måde som illustreret i figurene 14 og 16.

OPGAVE 9.4. I opgave 7.3 benyttes koordinaterne $\sigma_1 \cdot v_1$ som faktorer på $e = u_1$ med henblik på at rekonstruere projektiionspunkter på den første principale akse. Hvordan fremstilles tilsvarende projektiionspunkterne på den plan, der er udspændt af de to første principale akser? Illustrér med de punktmængder i rummet, som er brugt i opgave 9.3 ovenfor.

10 Klynger

Punktmængder optræder typisk i mere eller mindre veldefinerede 'klumper' eller klynger (clusters). Typisk ønsker man at kunne finde en opdeling af punktmængden i sådanne klynger med henblik

på at kunne klassificere de objekter, som datapunkterne repræsenterer, se [1]. Som det fremgår af den reference er det ikke nogen simpel sag, så vi vil her nøjes med at se på opdelinger af en given punktmængde i *to delmængder* og så finde de(n) opdeling(er) som er bedst. Men hvad betyder det at en opdeling er bedre end en anden? Vi vil benytte Fréchet målet til at fortælle hvor meget en given delmængde af en punktmængde 'fylder' og dermed hvor tæt den 'klumper sammen'. Som det fremgår af definitionen nedenfor kan det mål betragtes som et inertimoment omkring massemidtpunktet for punktmængden:

10.1 Definition af de bedste klyngedannelser

Definition 10.1. Lad $P = \{p_1, \dots, p_n\}$, $n > 2$, være en given (nummereret) punktmængde (i rummet eller i planen). Et punkt kan gerne tælles med flere gange, men så hver gang med forskellige indeks-numre. Lad P_1 og P_2 betegne to udtømmende delmængder af P , sådan at $P_1 \cup P_2 = P$ og sådan at numrene i P_1 er forskellige fra numrene i P_2 . Vi definerer så Fréchet målet for hver af delmængderne således:

$$\text{FM}(P_1) = \sum_{j|p_j \in P_1} \|p_j - \mu_1(P_1)\|^2 = \sum_{j|p_j \in P_1} (p_j - \mu_1(P_1)) \bullet (p_j - \mu_1(P_1)) \quad , \quad (10.1)$$

hvor $\mu_1(P_1)$ er massemidtpunktet for P_1 . Tilsvarende defineres $\text{FM}(P_2)$.

Og den bedste opdeling fås så via denne naturlige definition:

Definition 10.2. En optimal (bedst mulig) klyngeopdeling af P i to klynger \hat{P}_1 og \hat{P}_2 er karakteriseret ved at summen af deres to Fréchet mål er mindst:

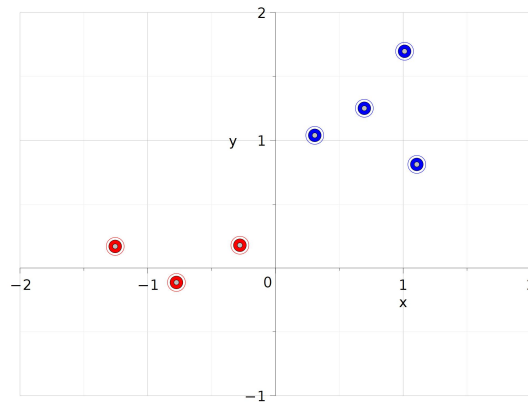
$$\left(\hat{P}_1, \hat{P}_2\right) = \operatorname{argmin}_{(P_1, P_2)} (\text{FM}(P_1) + \text{FM}(P_2)) \quad . \quad (10.2)$$

Det er oplagt, at der findes en sådan opdeling med \hat{P}_1 og \hat{P}_2 og et tilsvarende minimumsværdi $\text{FM}(\hat{P}_1) + \text{FM}(\hat{P}_2)$ fordi der 'kun' er endeligt mange opdelinger af den givne punktmængde.

OPGAVE 10.3. Givet tallene $1, \dots, n$, $n > 2$. Find antallet af opdelinger af talmængden i to disjunkte mængder, der hver indeholder mindst to tal og som tilsammen indholder alle tallene.

Der er imidlertid nu (mindst) to problemer: Antallet af opdelinger bliver hurtigt astronomisk og derfor beregningsmæssigt meget tungt. Dertil kommer, at vi må forvente, at der typisk vil optræde flere forskellige opdelinger, par af klynger, som giver samme minimumsværdi $\text{FM}(\hat{P}_1) + \text{FM}(\hat{P}_2)$.

Med 7 punkter, som f.eks. de givne test-punkter i (2.2), kan det godt lade sig gøre at checke alle par af P_1 og P_2 og nå frem til en entydig bedst klyngeopdeling som vist i figur 17.



Figur 17: De 7 punkter fra (2.2) opdelt i to optimale klynger. Frechét målene er henholdsvis $FM(P) = 7.62$, $FM(\hat{P}_1) = 0.53$, $FM(\hat{P}_2) = 0.82$.

OPGAVE 10.4. Eftervis helt konkret, at den bedste opdeling af de 7 punkter fra (2.2) i to klynger – i henhold til definitionerne 10.1 og 10.2 – er den, der er vist i figur 17 og med de der angivne Frechét mål.

10.2 PCA-hjælp hen imod de bedste klyngedannelser

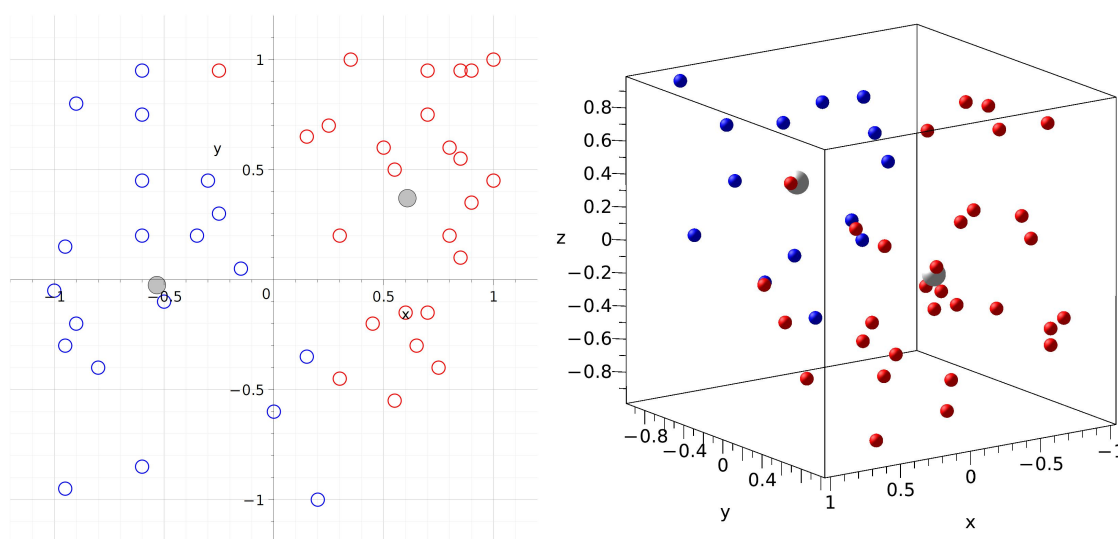
Som allerede bemærket en passant i afsnit 6.2 er projektionerne af en given punktmængde på den første principale akse typisk spredt ud langs den akse, hvilket så også naturligvis gælder for projektionerne af de to bedste klynger. Det er derfor en glimrende ide at dele *projektionspunkterne* i to mængder og derefter checke det totale Frechét mål for den tilsvarende opdeling af den oprindelige punktmængde. Den simplest mulige opdeling af projektionspunkterne fås ved at vælge et separationspunkt på akserne og definere P_1 som de punkter i P hvis projektioner på akserne ligger til venstre for separationspunktet og tilsvarende P_2 via projektionspunkterne til højre for separationspunktet. Blandt alle sådanne opdelinger findes så igen den eller de som minimerer det totale Frechét mål som i definition 10.2.

OPGAVE 10.5. Eftervis helt konkret, at den bedste opdeling af de 7 punkter fra (2.2) i to klynger med den ovenfor beskrevne metode er præcis den samme opdeling som fundet i opgave 10.4.

Nedenfor i figur 18 er PCA-projektions-metoden benyttet til at finde *gode kandidater* til de bedste opdelinger af større samlinger af datapunkter i planen og i rummet. Der kan kun være tale om 'gode kandidater', da der naturligvis går informationer tabt ved enhver projektion fra et større rum til en linje.

OPGAVE 10.6. Find eksempler på datapunkter (blot i planen) for hvilke de to metoder giver forskellige klyngeopdelinger, og hvor PCA-klyngeopdelingen ikke er optimal. Vink: Måske kan projektionerne på *anden principale akse* tilføje noget af den tabte information fra projektionerne på den første principale akse.

I praksis vil man typisk benytte en såkaldt k -means algoritme, som er en iterativ metode til bestemmelse af k klynger med mindste totale Frechét mål, se [1] og [2]. Stukturen og konvergensens af sådanne algoritmer er et interressant videregående studium i sig selv. Ovenfor har vi kun antydnet hvad der er på spil – og så endda kun i højst 3D og kun for $k = 2$!



Figur 18: Tilfældige punktmængder i 2D og 3D med klyngekonfigurationer konstrueret på basis af opdeling via første principale akse. De respektive massemidtpunkter for klyngerne er angivet med gråt.

Litteratur

- [1] K-means clustering: [Wikipedia/K-means](#)
- [2] Lloyd's algorithm: [Wikipedia/Lloyd's algorithm](#)
- [3] Olav Lyndrup (red.) *Ekspérimentel Matematik - en inspirationsbog til undervisning*, Matematiklærerforeningen, 2007, [Link](#)
- [4] S. Markvorsen, *Integration i flere Variable*, Noter, DTU Compute, 2007, [Link](#).
- [5] S. Markvorsen, *Integrator 8 – En Maple pakke med procedurer til udregning af integraler i plan og rum*, DTU Compute, 2013, [Link](#).

- [6] Maple worksheet, [Link](#).
- [7] Principal Component Analysis: [Wikipedia/PCA](#).
- [8] Singular Value Decomposition: [Wikipedia/SVD](#)
- [9] G. Strang, *Linear Algebra and its Applications*. Fourth edition. Thomson Books, 2006.