

## 6.4. Transformata de înălbire

### 6.4.1. Introducere

În problemele reale de clasificare apare adeseori necesitatea diagonalizării simultane a două matrici diferite de corelație sau covarianță.

**Exemplul 6.4:** O astfel de situație poate să apară, de exemplu, în aplicațiile practice de clasificare unde avem două clase pentru eșantionul de date disponibil. În cazul în care trăsăturile vectorului aleator multidimensional de trăsături,  $x$ , sunt corelate este de dorit aplicarea unei transformări care să ducă datele din spațiul inițial al trăsăturilor într-un nou spațiu, în care trăsăturile să fie, de exemplu, necorelate. Avantajul unei asemenea operații îl constituie, așa după cum știm, posibilitatea de a obține performanțe de clasificare mai ridicate inclusiv folosind un clasificator de tipul celui de minimă distanță. Obiectivul, în acest context, îl constituie găsirea acelei transformate care, aplicată tuturor datelor eșantionului (populației), să ne conducă la o diagonalizare simultană a celor două matrici de covarianță ce caracterizează, corespunzător, cele două clase. Un exemplu în acest sens este și problema tratată în **Subcapitolul 7.2.4** în care avem un vector aleator bidimensional de trăsături,  $x = [puls, presiune\ sistolică]^T$  și două clase: clasa  $\{obosit\}$  și, respectiv, clasa  $\{odihnit\}$ .

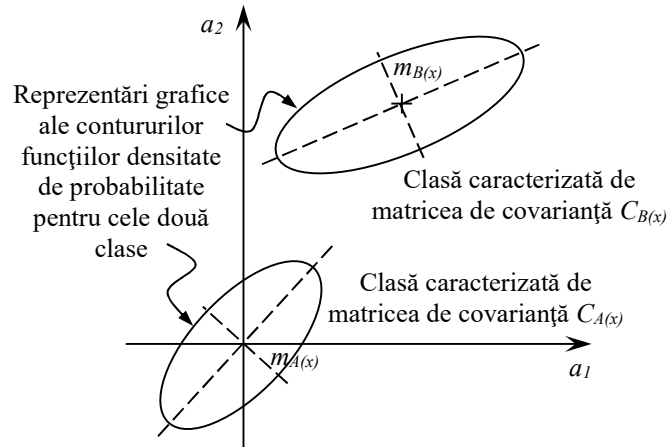
În cele ce urmează discutăm cazul unui eșantion de date statistice caracterizat de două clase distincte.

Din **Figura 6.7**, în care se prezintă distribuția celor două clase – prin intermediul a două elipse de concentrare –, se observă că este imposibil să obținem diagonalizarea simultană a matricelor de corelație numai prin acțiuni simple de rotire a sistemului inițial de coordonate (ne reamintim că un astfel de efect se poate obține prin aplicarea, în mod direct asupra datelor eșantionului, a unei transformate unitare).

În cazul cel mai general, prin intermediul transformatei unitare putem diagonaliza, cel mai adesea, cel mult o singură matrice de covarianță din cele două, cea de-a doua matrice de covarianță nou obținută nefiind și ea una tot diagonală.

Soluția, în acest caz, o reprezintă în fapt, așa după cum vom vedea în continuare, aplicarea unei anumite *transformate* ce are ca efect o combinație de rotiri și de scalări ale sistemului inițial de coordonate. Pentru a determina

această transformată particulară, avem nevoie să introducem, ca pas intermediar absolut necesar, definiția unei alte transformate, numită *de înălbire*, de care ne vom folosi în mod deosebit.



**Figura 6.7.** Exemplu de distribuție a datelor în spațiul inițial al trăsăturilor (spațiu caracterizat de existența a două clase).

#### 6.4.2. Transformata de înălbire

Transformată de înălbire (sau „albire”) a seturilor de date urmărește, în principal, următoarele două obiective:

- Primul obiectiv** are în vedere decorelarea setului de date prin aplicarea unei transformate liniare (în particular, transformata unitară). Noua matrice de covarianță rezultată după aplicarea acestei transformate va fi una diagonală.
- Cel de-al doilea obiectiv** vizează o scalare, în mod corespunzător, a setului de date astfel încât varianța fiecărei variabile aleatoare ce compune vectorul aleator de trăsături să fie egală cu unitatea. Noua matrice de covarianță ce rezultă în urma aplicării acestei ultime transformări va fi, așa după cum vom vedea, chiar matricea unitate.

Conform abordării prezentate în **Subcapitolul 6.3.2**, după determinarea valorilor proprii,  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_d$ , și, respectiv, a vectorilor proprii,  $e_1, e_2, \dots, e_d$ , asociați acestor valori proprii, putem defini matricea vectorilor proprii astfel:

$$E = \begin{bmatrix} | & | & \dots & | \\ e_1 & e_2 & \dots & e_d \\ | & | & \dots & | \end{bmatrix} \quad (6.107)$$

(a) Primul obiectiv îl vom atinge prin utilizarea transformatei  $A = E^{*T}$ :

$$y = E^{*T}x \quad (6.108)$$

Matricea de covarianță a noului vector aleator,  $y$ , devine una diagonală:

$$C_y = E^{*T}C_xE = \begin{bmatrix} - & e_1^{*T} & - \\ - & e_2^{*T} & - \\ & \vdots & \\ - & e_d^{*T} & - \end{bmatrix} C_x \begin{bmatrix} | & & & | \\ e_1 & e_2 & \dots & e_d \\ | & | & & | \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_d \end{bmatrix} = \Lambda \quad (6.109)$$

În acest mod am obținut, într-o primă fază, **decorelarea vectorului de trăsături**.

(b) Pentru atingerea celui de-al doilea obiectiv vom aplica – în cascadă cu transformata  $E^{*T}$  de mai sus – o nouă transformată, notată cu  $\Lambda^{-1/2}$ ; această transformată va determina ca matricea de covarianță a noului vector de variabile aleatoare să fie o matrice unitate.

Astfel, dacă matricea  $\Lambda$  este dată de relația (6.109) atunci vom avea:

$$\Lambda^{-1/2} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{\lambda_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{\lambda_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1/\sqrt{\lambda_d} \end{bmatrix} \quad (6.110)$$

Prin aplicarea acestei transformate vectorului aleator  $y$ :

$$z = \Lambda^{-1/2}y \quad (6.111)$$

vom obține în spațiul  $z$  următoarea matrice de covarianță:

$$C_z = \Lambda^{-1/2} \cdot C_y \cdot (\Lambda^{-1/2})^{*T} = \Lambda^{-1/2} \cdot \Lambda \cdot \Lambda^{-1/2} = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (6.112)$$

În scrierea relațiilor (6.112) s-a ținut cont de o proprietate a valorilor proprii, și anume aceea că: valorile proprii sunt întotdeauna numere reale.

Concluzionând cele de mai sus, vom spune că **transformata de înălbire** este dată de o matrice  $A$  ce este egală cu:

$$A = \Lambda^{-1/2}E^{*T} \quad (6.113)$$

unde notațiile folosite sunt cele cu semnificațiile de mai sus.

În urma aplicării acestei transformate se obține, simultan, atât decorelarea setului de date cât și scalarea acestuia astfel încât, în final, matricea de covarianță în spațiul  $z$  să fie matricea unitate.

**Observația 6.12:** Transformata de înălbire *nu este o transformată ortogonală*; în concluzie, nu conservă distanțele:

$$\|z\|^2 \neq \|x\|^2 \quad (6.114)$$

**Observația 6.13:** După aplicarea transformatei de înălbire, **matricea de covarianță obținută ( $C_z = I$ ) este invariantă la orice transformare ortonormală**. Pe baza acestei observații, în subcapitolul următor vom diagonaliza simultan matricile de covarianță pentru două clase distincte în vederea decorelării ambelor clase.

**Observația 6.14:** Transformata de înălbire este o transformată generică care se poate aplica oricărei matrici  $A$ . În consecință, această transformată se poate aplica inclusiv matricelor de corelație precum și celor de covarianță.

## 6.5. Diagonalizări simultane ale matricilor de covarianță aferente la două clase distincte

Pentru prezentarea acestei proceduri, de diagonalizare simultană a ambelor matrici, ne vom folosi de următoarele două matrici de covarianță, notate în continuare cu  $C_{A(x)}$  și  $C_{B(x)}$ . Două exemple de contururi caracteristice pentru aceste două matrici sunt reprezentate în **Figura 6.7**. Cu toate că în această reprezentare grafică discutăm cazul bidimensional, metoda de diagonalizare descrisă și prezentată în formă analitică în paragrafele următoare este una generală, capabilă să lucreze cu vectori  $d$ -dimensionali.

**Pașii de realizare ai procedurii de diagonalizare simultană sunt:**

1. Găsirea vectorilor și valorilor proprii pentru matricea  $C_{A(x)}$ , respectiv:

$$C_{A(x)} = E_A \Lambda_A E_A^{*T} \quad (6.115)$$

Reamintim că vectorii și, respectiv, valorile proprii sunt elemente ale matricelor  $E_A$  și, respectiv,  $\Lambda_A$ , din relația (6.115).

2. Aplicarea transformatei de înălbire pentru vectorul aleator  $x$ , de intrare:

$$T = \Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T} \quad (6.116)$$

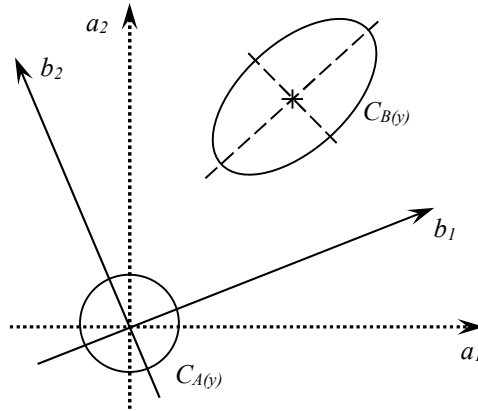
În aceste condiții, noul vector,  $y$ , va fi calculat cu relația:

$$y = \Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T} \cdot x \quad (6.117)$$

După cum s-a prezentat anterior, matricea  $\Lambda_A^{-1/2}$  este inversa matricii diagonale  $\Lambda_A^{1/2}$ , ale cărei elemente de pe diagonala principală sunt date de radicalul valorilor proprii.

Aplicând transformata anterior prezentată, vom obține pentru clasa  $A$  o matrice de covarianță egală cu matricea unitate:

$$\begin{aligned} C_{A(y)} &= (\Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T}) C_{A(x)} (\Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T})^{*T} = \\ &= \Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T} \cdot E_A \Lambda_A E_A^{*T} \cdot E_A \Lambda_A^{-1/2} = I \end{aligned} \quad (6.118)$$



**Figura 6.8.** Distribuțiile claselor după aplicarea transformatei de înălbire

Prin aplicarea transformatei dată de relația (6.117), cunoscută sub numele de transformată de “înălbire”, se obține (atenție! – doar pentru clasa  $A$ ), simultan cu decorelarea trăsăturilor, și o varianță egală cu unitatea pentru toate trăsăturile. Reprezentarea grafică a unui contur al funcției densitate de probabilitate pentru clasa  $A$  este redat în **Figura 6.8** sub forma unui cerc (varianțe egale pe toate direcțiile), de rază unitară.

Pentru clasa  $B$ , în urma aplicării transformatei dată de relația (5.131),

matricea de covarianță,  $C_{B(x)}$ , devine:

$$\begin{aligned} C_{B(y)} &= (\Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T}) C_{B(x)} (\Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T})^{*T} = \\ &= \Lambda_A^{-1/2} E_A^{*T} C_{B(x)} E_A \Lambda_A^{-1/2} \end{aligned} \quad (6.119)$$

Rezumând cele prezentate până aici, vom spune că efectul global al acestei prime transformări (de înălbire) aplicată tuturor datelor eșantionului rezidă, simultan:

- într-o rotire a sistemului inițial de coordonate (așa cum se prezintă și în **Figura 6.8**) și, respectiv,
- într-o scalare a datelor,

acestea având ca efect:

- pentru clasa  $A$ , diagonalizarea, într-o primă fază, și, transformarea, în final, într-o matrice unitate, a matricei de covarianță  $C_x(A)$  iar,
- pentru clasa  $B$ , efectul este unul nedefinit (a se vedea și reprezentarea grafică din **Figura 6.8**).

Aceste efecte, diferențiate pe clase, ale transformatei de înălbire aplicată eșantionului de date se datorează, bineînțeles, modului cum a fost construită aceasta, respectiv, utilizând valorile și vectorii proprii ai clasei  $A$ ; de aici, și efectul ei specific obținut doar asupra acestei clase.

3. Determinarea vectorilor și valorilor proprii pentru matricea  $C_{B(y)}$  în noul sistem de coordonate,  $y$ . Prin metodele cunoscute se determină matricea vectorilor proprii,  $E_B$ , și matricea valorilor proprii,  $\Lambda_B$ , asociate clasei caracterizată de matricea de covarianță  $C_{B(y)}$ .
4. Diagonalizarea matricei  $C_{B(y)}$  este ultimul pas al procedurii. Acest ultim obiectiv se atinge prin aplicarea următoarei transformate vectorului,  $y$ , de intrare:

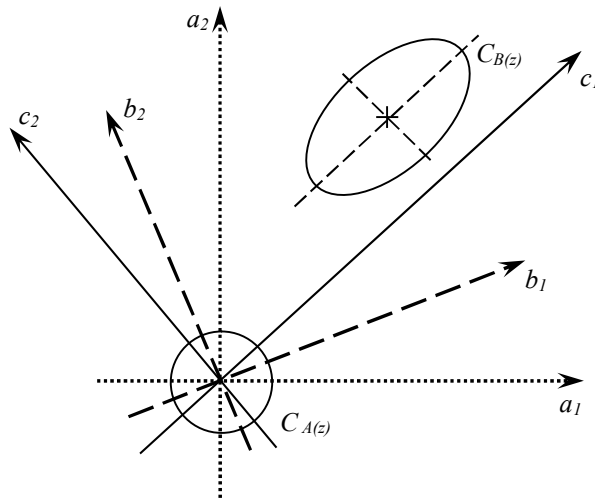
$$z = E_B^{*T} \cdot y \quad (6.120)$$

În acest caz, matricile de covarianță corespunzătoare celor două clase devin:

$$C_{B(z)} = E_B^{*T} C_{B(y)} E_B = \Lambda_B \quad (6.121)$$

și, respectiv,

$$C_{A(z)} = E_B^{*T} I E_B = I \quad (6.122)$$



**Figura 6.9.** Rezultatul final al procesului de diagonalizare simultană

Prin această ultimă transformare sistemul de coordonate este rotit din nou, așa după cum se poate observa și pe exemplul din **Figura 6.9**, iar efectul final este acela de diagonalizare și a matricei de covarianță pentru cea de a doua clasă.

Pe baza pașilor descriși anterior deducem ușor relația transformatei ce are ca efect transformarea setului original de date de o manieră similară ca cea prezentată mai sus. Astfel:

$$z = (E_{global})^{*T} \cdot x \quad (6.123)$$

unde:

$$E_{global} = E_A \Lambda_A^{-1/2} E_B \quad (6.124)$$

În spațiul final de reprezentare a datelor, matricea de covarianță  $C_{A(x)}$  inițială devine o matrice identitate, în timp ce matricea de covarianță  $C_{B(x)}$  inițială devine o matrice diagonală,  $\Lambda_B$ , ambele caracterizând distribuția elementelor claselor în noul plan, planul vectorului aleator  $z$ . Prin diagonalizarea simultană a matricilor de covarianță a claselor, componentele vectorului aleator  $z$  au devenit necorelate pentru fiecare clasă în parte.

**Aplicația 6.3:** Utilizând aplicația din directorul „Diagonalizări simultane”, asociat acestui capitol – aplicație ce implementează algoritmul de diagonalizare simultană a matricilor de covarianță ce caracterizează

două clase distincte (algoritm prezentat în **Subcapitolul 6.5**) – să se parcurgă următoarele cerințe:

1. Încărcați setul de date „CL2clase.txt”. Porniți procesul de diagonalizare simultană a matricilor de covarianță ce caracterizează cele două distribuții și urmăriți pașii prezentați anterior. Verificați, prin calcul direct, corectitudinea rezultatelor. Salvați setul de date final obținut după aplicarea transformatei globale (6.124).
2. După parcurgerea Capitolului 7 al cărții utilizați programul din directorul „Comparatie minDist-Mahalanobis-Bayes” pentru a analiza performanțele de clasificare comparative pe cei trei clasificatori implementați pe seturile de date „CL2clase.txt” și pe cel obținut după aplicarea transformatei globale (6.124).

## 6.6. Transformata inferior-superior triunghiulară

Cele mai importante aplicații ale unei descompuneri (factorizări) inferior-superior triunghiulară constă în calculul determinantului și al inversei unei matrici pătratice, respectiv, în rezolvarea sistemelor liniare de  $n$  ecuații cu  $n$  necunoscute. Ceea ce ne interesează însă pe noi este o altă utilitate a acestor descompuneri, utilitate ce rezidă din însăși modul cum au fost definite acestea.

Astfel, într-unul din subcapitolele precedente s-a prezentat o tehnică de diagonalizare a matricilor de corelație și de covarianță cu ajutorul transformatei unitare. O altă tehnică de diagonalizare a acestor matrici este dată de metoda **descompunerii în matrici triunghiulare**, particularizată în cazul acestui capitol prin **descompunerea Cholesky**. Această metodă de descompunere în matrici triunghiulare conduce către o transformată care poate fi interpretată, în funcție de forma exactă a descompunerii, ca o operație de filtrare cauzală sau necauzală a secvenței căreia i se aplică.



### 6.6.1. Descompunerea în matrici inferior-superior triunghiulare

O matrice pătratică  $A \in R^{n \times n}$  nesingulară<sup>8</sup> admite o descompunere în matrici inferior-superior triunghiulare (descompunere  $LU$ <sup>9</sup>) dacă și numai dacă toți minorii săi principali,  $A_k$  ( $k=1, \dots, n-1$ ) sunt nesingulari. În cazul în care o astfel de descompunere există (respectiv, matricea  $A$  îndeplinește condițiile de mai sus) atunci, descompunerea  $LU$  permite scrierea matricei  $A$  ca un produs dintre o matrice inferior triunghiulară  $L$  și o matrice superior triunghiulară  $U$  astfel:

$$A = L \cdot U \quad (6.125)$$

În forma extinsă, relația de mai sus se scrie și:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}}_U \quad (6.126)$$

Factorizarea dată sub forma relației (6.125), atunci când ea există, nu este unică, în literatura de specialitate fiind prezentate, printre alte descompuneri posibile, trei astfel de factorizări  $LU$  fundamentale, respectiv:

- (a) factorizarea *Doolittle* – în care termenii diagonali ai matricei inferior triunghiulare,  $L$ , sunt toți unitari (altfel spus, toate elementele de pe diagonala principală sunt egale cu 1,  $l_{ii} = 1$ , în timp ce toate elementele superioare diagonalei principale sunt egale cu zero); în acest caz, matricea  $L$  poartă numele de matrice inferior triunghiulară unitară;
- (b) factorizarea *Crout* – în care toți termenii de pe diagonala principală a matricei superior triunghiulare  $U$  sunt egali cu 1 ( $u_{ii} = 1$ ); în acest caz matricea  $U$  se mai numește și matrice superior triunghiulară unitară și, ultima variantă,
- (c) factorizarea *Cholesky*<sup>10</sup> – în care cele două matrici din relația (6.126) se află într-o relație de forma:

$$U = L^{*T} \quad (6.127)$$

În acest caz,  $l_{ii} = u_{ii}$ , pentru toți  $i$ .

<sup>8</sup> O matrice pătratică se numește nesingulară dacă determinantul ei este nenul.

<sup>9</sup> În engleză, *lower-upper* decomposition.

<sup>10</sup> Această ultimă descompunere a fost denumită după numele descoperitorului ei, respectiv, matematicianul francez *André-Louis Cholesky*.

Factorizarea  $LU$  este **unică** atunci când fie matricea  $L$ , fie matricea  $U$  din descompunerea  $LU$  sunt matrici inferior, respectiv, superior triunghiulare **unitare**. În acest context, toate cele trei variante de descompunere prezentate mai sus sunt descompuneri unice.

Pe lângă descompunerea  $LU$  a unei matrici pătratice nesingulară există și **descompunerea (factorizarea)  $LDU$**  a acesteia, dată de:

$$A = L \cdot D \cdot U \quad (6.128)$$

unde:  $L$  este o matrice inferior triunghiulară unitară,  $U$  este o matrice superior triunghiulară unitară iar  $D$  este o matrice diagonală. Existența unei astfel de descompuneri presupune aceleași condiții de îndeplinit de către matricea  $A$ , ca și în cazul factorizării  $LU$ . În plus, din modul cum a fost definită rezultă imediat și caracterul unic al factorizării  $LDU$ .

**Observația 6.15:** Dacă există o descompunere  $LDU$  pentru o matrice nesingulară,  $A$  (vezi relația (6.128)) atunci, ținând cont de modul cum au fost definite mai sus cele trei descompuneri  $LU$  fundamentale, precum și de faptul că toate acestea reprezintă descompuneri unice atunci, factorizarea  $LDU$  este echivalentă cu:

- o *factorizare Doolittle* astfel:

$$A = L \cdot (D \cdot U) = L \cdot U_{Doolittle} \quad (6.129)$$

- o *factorizare Crout* astfel:

$$A = (L \cdot D) \cdot U = L_{Crout} \cdot U \quad (6.130)$$

iar în cazul în care matricea  $A$  este simetrică și pozitiv definită, cu

- o *factorizare Cholesky* astfel:

$$A = (L \cdot D_1) \cdot (D_1 \cdot U) = L_C \cdot L_C^{*T} \quad (6.131)$$

unde matricea  $D_1 = \text{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n})$  este dată de relațiile (6.127) și, respectiv, (6.137). Modul cum se deduce această matrice va fi prezentat în cele ce urmează.

### 6.6.2. Descompunerea Cholesky

Dacă matricea  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  este o matrice nesingulară și, în plus, ea mai este și **simetrică** și **pozitiv definită** atunci aceasta poate fi descompusă folosind descompunerea *Cholesky* dată de relația:

$$A = L_C \cdot L_C^{*T} \quad (6.132)$$

unde  $L_C$  este o matrice inferior triunghiulară ale cărei elemente de pe diagonala principală sunt strict pozitive iar  $L_C^{*T}$  este matricea  $L_C$  transpusă și complex conjugată.

**Descompunerea Cholesky** – definită, așa cum am văzut mai sus, pentru matrici  $A$  simetrice și pozitiv definite – este o **descompunere unică**. Cu alte cuvinte, pentru o matrice  $A$  îndeplinind condițiile de mai sus va exista întotdeauna doar o singură matrice inferior triunghiulară care să aibă elementele de pe diagonala principală strict pozitiv definite și care să satisfacă relația (6.132).

Inversa afirmației precedente este, de asemenea, adevărată. Astfel, dacă avem o matrice  $A$  care se poate descompune sub forma dată de relația (6.132), în care  $L$  este o matrice inferior triunghiulară ce are toate elementele de pe diagonala principală mai mari strict decât zero atunci această matrice este simetrică și pozitiv definită.

Întrucât toate matricile de covarianță satisfac ambele condiții cerute pentru o descompunere de tip *Cholesky*, fiind, în plus, Hermitian-simetrice, descompunerea acestora poate fi făcută într-o reprezentare *LDU* ca un produs de matrici de forma<sup>11</sup>:

$$C_x = L \cdot D_L \cdot L^{*T} \quad (6.133)$$

În relația de mai sus matricea  $L$  este o matrice inferior triunghiulară unitară iar matricea  $D_L$  este o matrice diagonală (diferită, în general, de matricea unitate). Se observă de aici ușor că și matricea  $L^{*T}$  este, la rândul ei, o matrice superior triunghiulară unitară (respectiv, toate elementele ei diagonale sunt egale cu unitatea iar termenii aflați sub diagonala principală sunt toți egali cu zero).

**Observația 6.16:** Tot din relația (6.133) se mai poate observa faptul că matricea  $L$  din descompunerea (6.133) este una diferită de matricea  $L_C$  a descompunerii de tip *Cholesky* aplicată aceleiași matrici de covarianță (vezi relația generală (6.132)). De altfel, între matricile  $L_C$  și  $L$  ale celor două descompuneri – (6.132) și, respectiv, (6.133) – există următoarea relație clar definită:

<sup>11</sup> În mod similar, și toate matricile de corelație pot fi descompuse într-o formă de tip *LU*, adică:

$$R_x = L \cdot D_L \cdot L^{*T}$$

În relația anterioară, în modul cel mai general, matricile  $L$  și  $D_L$  sunt diferite de cele din relația (6.133), descompunerea în forma *LU*, fiind unică. Aceste două matrici,  $R_x$  și  $C_x$ , au descompuneri identice doar atunci când ele sunt egale (respectiv, atunci când vectorul medie al vectorului aleator  $x$  este zero).

- să presupunem că scriem matricea  $C_x$  sub forma descompunerii *Cholesky* astfel:

$$C_x = L_C \cdot L_C^{*T} \quad (6.134)$$

și totodată descompunem aceeași matrice  $C_x$  sub forma dată de relația (6.133):

$$C_x = L \cdot D_L \cdot L^{*T} \quad (6.135)$$

- în relația (6.135) matricea  $D_L$  este dată de o matrice de forma:

$$D_L = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \end{bmatrix} = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n) \quad (6.136)$$

- din relațiile (6.134), (6.135) și (6.136) se poate deduce ușor relația dintre matricile  $L$  și  $L_C$ , respectiv:

$$L_C = L \cdot \text{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n}) \quad (6.137)$$

**Observația 6.17:** Având în vedere echivalența dintre factorizarea *LDU* și factorizarea *Doolittle* dată de relația (6.129) și, în plus, ținând cont de descompunerea *LDU* a unei matrici de covarianță (vezi relația (6.133)), obținem:

$$D_L \cdot L^{*T} = U_{\text{Doolittle}} \quad (6.138)$$

Întrucât  $L^{*T}$  este o matrice *superior triunghiulară unitară*, rezultă din ecuația de mai sus că elementele de pe diagonala principală a matricii  $U_{\text{Doolittle}}$  sunt chiar elementele de pe diagonala principală a matricii diagonale  $D_L$ .

Reamintim aici că **descompunerea dată sub forma relației (6.133) este și ea, la rândul ei, unică**, fiind o descompunere de tip *LDU*, particularizată pentru matrici simetrice și pozitiv definite.

Dacă în relația (6.133) înmulțim în stânga cu  $L^{-1}$  și în partea dreaptă cu  $(L^{*T})^{-1}$  obținem:

$$L^{-1} C_x (L^{-1})^{*T} = D_L \quad (6.139)$$

De aici se poate observa că  $D_L$  este, de fapt, matricea de covarianță,  $C_y$ , pentru un vector aleator  $y$  obținut din vectorul aleator  $x$  cu ajutorul următoarelor transformate:

$$y = L^{-1} x \quad (6.140)$$

Deoarece  $D_L$  este o matrice diagonală, componentele vectorului aleator  $y$  sunt necorelate iar elementele diagonale ale matricii  $D_L$  sunt însăși momentele de ordin doi (varianțele) fiecărei trăsături în parte.

În timp ce transformata bazată pe vectorii proprii (transformata unitară) poate fi interpretată ca o rotire a sistemului de coordonate, transformata dată de relația (6.140) poate fi interpretată drept o transformare cauzală.

**Problemă 6.13:** Utilizând mediul de dezvoltare LabWindows CVI scrieți un program care să descompună următoarea matrice de covarianță într-un produs de matrici similar relației (6.133):

$$C_x = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \\ 1 & 1 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}$$

**Rezolvare: (1).** ntr-o primă variantă, utilizând una funcțiile oferite de biblioteca „Advanced analysis” a mediului de dezvoltare LabWindow CVI, mai exact funcția  $LU$ , putem realiza descompunerea inferior-superior triunghiulară a matricii de mai sus (programul implementat îl găsiți în directorul **Descompunere LU** asociat acestui capitol). Această funcție acceptă drept intrare o matrice ce urmează a fi descompusă în forma dată de descompunerea  $LU$  de tip *Doolittle*. La terminarea execuției funcției  $LU$  rezultatul obținut este întors în aceeași matrice în care au fost furnizate datele de intrare, respectiv: matricea  $U$  ocupă partea triunghiular superioară a matricii de intrare, inclusiv elementele de pe diagonala principală, în timp ce matricea  $L$  ocupă partea triunghiular inferioară a aceleiași matrici. În final, ținând cont de particularitatea matricii  $L$  din descompunerea *Doolittle*, se trece la distribuirea corespunzătoare a elementelor matricii rezultante în cele două matrici ale descompunerii  $LU$ , respectiv:

$$C_x = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 \\ 1/4 & 1/2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 \\ 0 & 3/8 \end{bmatrix}}_U \quad (6.141)$$

Din relația de mai sus se observă că descompunerea astfel obținută este diferită față de cea prezentată în relația (6.133) – descompunere la care, de altfel, dorim să ajungem. Pentru aceasta ne vom folosi de faptul că elementele de pe diagonala principală a matricii  $D_L$  sunt identice cu elementele de pe diagonala principală a matricii  $U$  din descompunerea anterior prezentată (vezi **Observația 6.17**). În acest caz, forma finală a descompunerii este dată de:

$$C_x = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 \\ 1/4 & 1/2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 3/8 \end{bmatrix}}_{D_L} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^T} \quad (6.142)$$

(2). Mediul de dezvoltare LabWindow CVI dispune, de asemenea, în propriile librării și de o funcție capabilă să efectueze descompunerea *Cholesky*. În această a doua abordare a problemei, utilizând funcția de mai sus în cadrul programului din directorul **Descompunere LU** obținem:

$$C_x = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/4 \\ 1/4 & 1/2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0.7071 & 0 \\ 0.3536 & 0.6124 \end{bmatrix}}_{L_C} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 0.7071 & 0.3536 \\ 0 & 0.6124 \end{bmatrix}}_{L_C^{*T}} \quad (6.143)$$

Pentru a ajunge la forma (6.133) plecăm de la matricea  $L_C$

$$L_C = \begin{bmatrix} l_{C1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{C2,1} & l_{C2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{Cn,1} & l_{Cn,2} & \cdots & l_{Cn,n} \end{bmatrix} \quad (6.144)$$

și ne folosim de relațiile:

$$\text{diag}(L_C) = \begin{bmatrix} l_{C1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & l_{C2,2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{Cn,n} \end{bmatrix} \quad (6.145)$$

$$D_L = \text{diag}(L_C) \cdot \text{diag}(L_C) = \begin{bmatrix} l_{C1,1}^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & l_{C2,2}^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{Cn,n}^2 \end{bmatrix} \quad (6.146)$$

și

$$L = L_C \cdot [\text{diag}(L_C)]^{-1} \quad (6.147)$$

Relațiile (6.146) și (6.147) rezultă în mod direct din (6.134), (6.135), (6.136) și (6.137).

Particularizând relațiile (6.146) și (6.147) obținem:

$$\text{diag}(L_c) = \begin{bmatrix} 0.7071 & 0 \\ 0 & 0.6124 \end{bmatrix}$$

și de aici:

$$D_L = \begin{bmatrix} 0.4999904 & 0 \\ 0 & 0.3750337 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.375 \end{bmatrix}$$

În final, utilizând relația (6.147) obținem:

$$L = \begin{bmatrix} 0.7071 & 0 \\ 0.3536 & 0.6124 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/0.7071 & 0 \\ 0 & 1/0.6124 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1/2 & 1 \end{bmatrix}$$

**Problemă 6.14:** Se dă următoarea matrice de covarianță:

$$C_x = \begin{bmatrix} 3 & -3 & -6 \\ -3 & 4 & 8 \\ -6 & 8 & 20 \end{bmatrix}$$

- Să se găsească – de această dată, printr-o metodă manuală de calcul – descompunerea  $LU$  a acestei matrici și, respectiv, descompunerea dată de o relație similară cu relația (6.133).
- Folosind descompunerea  $LU$  să se determine matricea transformării  $A$  ( $y = A \cdot x$ ) care va determina ca în noul spațiu, cel al vectorului  $y$  de trăsături, componentele vectorului aleator  $y$  să fie necorelate.
- Determinați matricea de covarianță ce caracterizează noul vector aleator de trăsături,  $y$ , obținut la punctul (b).

**Rezolvare:**

- Metoda clasică** utilizată în descompunerea unei matrici nesingulare  $A$  în două matrici de tipul inferior-superior triunghiulare,  $A = L \cdot U$ , se bazează pe metoda de reducere Gauss. În cazul utilizării acestei metode de reducere, simultan aplicată și asupra unei matrici identitate de aceeași dimensiune cu  $A$ , vom obține în final, în același timp, atât matricea superior triunghiulară,  $U$ , cât și matricea  $L^{-1}$  (inversa matricii inferior triunghiulară,  $L$ , a descompunerii  $LU$ ).

Pentru obținerea simultană și a matricii  $L^{-1}$ , o dată cu obținerea matricii  $U$ , vom pune în paralel cu matricea  $C_x$  și matricea identitate – metoda reducerii *Gauss* aplicând-se, așa cum am spus, simultan ambelor matrici:

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ -3 & 4 & 8 & 0 & 1 & 0 \\ -6 & 8 & 20 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad (6.148)$$

Scopul final al metodei este acela de a reduce la zero toate elementele poziționate sub diagonala principală a matricii  $C_x$ , matricea rezultantă fiind, în acest caz, matricea  $U$  superior triunghiulară a descompunerii  $LU$ . Operațiile efectuate asupra matricii  $C_x$  vor fi efectuate simultan și asupra matricii identitate,  $I$ ; matricea ce rezultă în final în acest caz va fi matricea  $L^{-1}$  prezentată mai sus.

Metoda de reducere Gauss:

- Într-un prim pas vom reduce la zero elementele din prima coloană, mai exact acele elemente poziționate sub primul element aflat pe diagonala principală a matricii  $C_x$ . Pentru a ne atinge acest obiectiv vom multiplica de fiecare dată prima linie cu o anumită valoare astfel încât în momentul scăderii acestei linii din liniile inferioare să rezulte o valoare zero în prima poziție a liniei inferioare respective. Aceste elemente multiplicative, corespunzând diferitelor linii din matricea  $C_x$ , se numesc **pivoți**. Ca mențiune: elementele primei linii rămân nemodificate pe parcursul întregului procedeu. Aplicând acest algoritm relativ simplu obținem pentru problema noastră:

$$\underbrace{\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ -3 & 4 & 8 & 0 & 1 & 0 \\ -6 & 8 & 20 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]}_{C_x} \xrightarrow{-1} \underbrace{\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ -6 & 8 & 20 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right]}_I \xrightarrow{-2} \left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 2 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

$$(6.149)$$

Pivoții utilizați pentru punerea pe zero a elementelor din prima coloană, poziționate sub diagonala principală, au fost notați deasupra săgeților ce marchează diferitele transformări, aplicate simultan, celor două matrici,  $C_x$  și  $I$ .

- Într-un pas următor (final, dealtfel în cazul nostru particular) se vor pune pe zero și elementele din cea de a doua coloană poziționate sub diagonala principală. Metoda folosită este una similară cu cea prezentată mai sus, cu observația că de această dată se va înmulți linia doi cu pivoții corespunzători liniilor următoare din matrice și ulterior se va scădea corespunzător din fiecare linie inferioară în parte. Generalizând, în cazul unor matrici de dimensiuni mai mari,



procedul continuă în mod similar până la inclusiv penultima coloană a matricei de interes. În cazul nostru obținem:

$$\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 2 & 0 & 1 \end{array} \right] \xrightarrow{2} \underbrace{\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & -2 & 1 \end{array} \right]}_{U} \underbrace{\left[ \begin{array}{ccc|ccc} 3 & -3 & -6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & -2 & 1 \end{array} \right]}_{L^{-1}} \quad (6.150)$$

În relația (6.150) observăm că, pe lângă matricea superior triunghiulară obținem simultan și inversa matricei inferior triunghiulare unitare,  $L^{-1}$ , care nu este altceva decât chiar matricea transformării din spațiul inițial al vectorului aleator  $x$  – caracterizat de matricea de covarianță  $C_x$  – într-un alt spațiu  $y$ , caracterizat de o matrice de covarianță,  $C_y$ , dată de matricea diagonală  $D_L$ .

Matricea inferior triunghiulară unitară se obține, în final, dintr-o matrice unitate,  $I$ , în care se inserează pivoții obținuți în timpul metodei de *reducere Gauss*. Acești pivoți vor fi inserați în acele poziții specifice la care au contribuit în procesul de reducere la zero a diferitelor elemente ale matricii inițiale  $C_x$ .

În aceste condiții, și ținând cont și de pivoții folosiți în procedeul Gauss de reducere, matricea inferior triunghiulară unitară calculată pentru matricea  $C_x$  inițială va fi:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad (6.151)$$

În final, descompunerea matricei  $C_x$  în formatul  $LU$  va fi dată de:

$$C_x = \begin{bmatrix} 3 & -3 & -6 \\ -3 & 4 & 8 \\ -6 & 8 & 20 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & -3 & -6 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}}_U \quad (6.152)$$

În continuare, pentru obținerea descompunerii matricei  $C_x$  într-un format similar cu cel dat de relația (6.133) vom ține cont de **Observația 6.17**, respectiv: elementele de pe diagonala principală a matricei  $D_L$  sunt elementele de pe diagonala principală a matricei  $U$  rezultată în urma descompunerii matricei  $C_x$ , relația (6.152). Știind toate acestea putem în final scrie:

$$C_x = \begin{bmatrix} 3 & -3 & -6 \\ -3 & 4 & 8 \\ -6 & 8 & 20 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}}_L \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}}_{C_y = D_L} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{L^{*T}} \quad (6.153)$$

- (b) Pentru decorelarea trăsăturilor unui vector aleator  $x$  vom utiliza transformata  $A = L^{-1}$ :

$$y = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 1 \end{bmatrix}}_{L^{-1}} \cdot x \quad (6.154)$$

- (c) Transformata  $A$  determină ca în noul spațiu – cel al vectorului aleator de trăsături  $y$  –, trăsăturile să fie necorelate. Matricea de covarianță în noul spațiu de trăsături este, în acest caz, chiar matricea diagonală din descompunerea dată de relația (5.152):

$$C_y = D_L = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad (6.155)$$

**Aplicație 6.4:** Utilizând programul aflat în directorul **Gen\_distrib\_2D\_Gauss** asociat acestui capitol al cărții:

1. Determinați relațiile matematice, respectiv, transformata, prin intermediul căreia puteți să transformați cele două variabile aleatoare  $n_1$  și  $n_2$  necorelate (ambele având o distribuție de tipul  $\mathcal{N}(0, 1)$ ) ale vectorului aleator  $x$  într-un vector aleator  $z$  caracterizat de o matrice de covarianță  $C_z$ . În spațiul vectorului aleator  $z$  va exista între trăsături o corelație  $\rho$  iar acestea vor avea varianțele  $\sigma_1^2$  și  $\sigma_2^2$ . După deducerea relațiilor verificați corectitudinea implementării acestora în cadrul programului prezentat anterior.
2. Pentru următoarele valori ale varianțelor și ale coeficientului de corelație între variabilele aleatoare ale vectorului  $z$  determinați matricile de covarianță corespondente:

- i.  $\sigma_1^2 = 4$ ,  $\sigma_2^2 = 9$ ,  $\rho = 0.2$ ,
- ii.  $\sigma_1^2 = 4$ ,  $\sigma_2^2 = 9$ ,  $\rho = 0.6$ ,
- iii.  $\sigma_1^2 = 4$ ,  $\sigma_2^2 = 9$ ,  $\rho = 0.8$ ,
- iv.  $\sigma_1^2 = 4$ ,  $\sigma_2^2 = 9$ ,  $\rho = 1$ .

3. Determinați pentru aceiași parametri prezentați la punctul 2 și matricile transformării ( $z = A \cdot x$ ).
4. Generați seriile de date, pe baza matricilor de covarianță anterior determinate, și analizați-le ulterior cu ajutorul programului din directorul ***Determinare Contur si Decorelare***.
5. Verificați corectitudinea rezultatelor obținute.

### **Rezolvare:**

1. Cerința primului punct este aceea de a găsi o transformată  $A$ :

$$z = A \cdot x \quad (6.156)$$

astfel încât, plecând din spațiul  $x$  de trăsături caracterizat de o matrice de covarianță unitară să ajungem în spațiul  $z$  caracterizat de o matrice de covarianță  $C_z = \begin{bmatrix} c_{z11} & c_{z12} \\ c_{z21} & c_{z22} \end{bmatrix}$ , ținându-se cont de

următoarele constrângeri: variabilele aleatoare vor fi corelate cu un coeficient de corelație  $\rho$  și, în plus, acestea vor avea varianțele  $\sigma_1$  și  $\sigma_2$ .

Prin utilizarea relațiilor (5.200), (5.201), și (5.243):

$$c_{kl} = \text{Cov}(x_k, x_l) = E\{ (x_k - m_k)(x_l - m_l)^* \} \quad (6.157)$$

$$c_{kk} = E\{ |x_k - m_k|^2 \} = \sigma_{xk}^2 \quad (6.158)$$

$$\rho = \frac{\text{Cov}(x_k, x_l)}{\sigma_{xk} \cdot \sigma_{xl}} \quad (6.159)$$

putem scrie matricea de covarianță ce caracterizează distribuția spațială a datelor date de vectorul aleator  $z$  sub forma:

$$C_z = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \quad (6.160)$$

Întrucât în cadrul acestei cărți s-au prezentat câteva tehnici prin care s-a realizat decorelarea trăsăturilor unui vector aleator (transformata unitară, transformata LU, utilizarea descompunerii în valori singulare) și scalarea seturilor de date astfel încât varianța fiecărei variabile aleatoare ce compune vectorul aleator să fie egală cu unitatea (transformata de înălbire) ne vom folosi de toate aceste cunoștințe dobândite și vom merge cu procesarea datelor în sens invers relației (6.156). Cu alte cuvinte, vom determina o matrice  $B$  astfel încât:

$$x = B \cdot z \quad (6.161)$$

Deci, plecând de la matricea  $C_z$  dată de relația (6.160) trebuie să ajungem, în final, la o matrice de covarianță în spațiul  $x$  unitară. O dată determinată matricea  $B$ , transformata dorită  $A$  va fi dată de  $A = B^{-1}$ .

Pentru decorelarea setului inițial de date vom utiliza descompunerea *Cholesky*. Prin intermediul acestei transformate, conform teoriei prezentate anterior și folosind relația (6.133) matricea de covarianță  $C_z$  se va descompune sub forma:

$$C_z = L \cdot D_L \cdot L^{*T} \quad (6.162)$$

de unde obținem mai departe,

$$L^{-1} \cdot C_z \cdot (L^{-1})^{*T} = D_L \quad (6.163)$$

Rezultă de aici că transformata  $y = C \cdot x$  care ne duce din spațiul  $z$  într-un spațiu  $y$  al trăsăturilor necorelate (nu neapărat și de varianță unu) este transformata  $C = L^{-1}$ .

Aplicând metoda de reducere *Gauss* descompunem matricea  $C_z$  astfel:

$$C_z = \left[ \begin{array}{cc|cc} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 & 1 & 0 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 & 0 & 1 \end{array} \right] \xrightarrow{\rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1}} \underbrace{\left[ \begin{array}{cc|cc} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 & 1 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 - \rho^2\sigma_2^2 & -\rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1} & 1 \end{array} \right]}_{U} \underbrace{\left[ \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right]}_{L^{-1}}$$

(6.164)

Prin utilizarea pivoților (pivotului în cazul nostru particular) se poate determina în mod direct matricea  $L$ :

$$L = \left[ \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1} & 1 \end{array} \right] \quad (6.165)$$

Descompunerea finală a matricii  $C_z$  va fi, în acest caz:

$$C_z = \left[ \begin{array}{cc} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{array} \right] = \underbrace{\left[ \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1} & 1 \end{array} \right]}_L \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{cc} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 - \rho^2\sigma_2^2 \end{array} \right]}_{D_L} \cdot \underbrace{\left[ \begin{array}{cc} 1 & \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \\ 0 & 1 \end{array} \right]}_{L^T}$$

(6.166)

În urma aplicării transformatei  $C = L^{-1}$  vom obține o trecere din spațiul  $z$  în spațiul  $y$ :

$$z \xrightarrow{L^{-1}} y \quad (6.167)$$

În noul spațiu de trăsături acestea sunt necorelate, dovada fiind dată de forma diagonală a matricei de covarianță:

$$C_y = D_L = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2(1-\rho^2) \end{bmatrix} \quad (6.168)$$

Pentru ca matricea de covarianță în spațiul  $x$  să fie egală cu matricea unitate vom aplica o nouă transformată  $\Lambda^{-1/2}$ , transformată similară cu cea utilizată în cadrul subcapitolului “*Diagonalizări simultane ale matricelor de covarianță a două clase distincte*”. Această matrice va fi de forma:

$$\Lambda^{-1/2} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \end{bmatrix} \quad (6.169)$$

În urma aplicării transformatei (6.169) vom trece din spațiul  $y$ , caracterizat de matricea de covarianță (6.168), în spațiul  $z$  unde matricea de covarianță va fi egală cu:

$$C_x = \Lambda^{-1/2} C_y (\Lambda^{-1/2})^{*T} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2(1-\rho^2) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2\sqrt{1-\rho^2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (6.170)$$

Prin această aplicare, în cascadă, a celor două transformate am obținut:

$$z \xrightarrow{L^{-1}} y \xrightarrow{\Lambda^{-1/2}} x$$

$$C_z = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{bmatrix} \quad C_y = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2(1-\rho^2) \end{bmatrix} \quad C_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (6.171)$$

De aici deducem relația matematică a transformatei care ne-ar duce din spațiul vectorului aleator  $z$  în spațiul vectorului aleator  $x$ , în condițiile specificate de aplicație:

$$x = \Lambda^{-1/2} \cdot L^{-1} \cdot z \quad (6.172)$$

Pentru determinarea transformatei  $A$  definită în (6.156) vom înmulți la stânga relația (6.172) mai întâi cu  $\Lambda^{1/2}$ , iar apoi vom înmulți cu matricea  $L$ , în final obținându-se:

$$z = \underbrace{L \cdot \Lambda^{1/2}}_A \cdot x \quad (6.173)$$

Transformata care îndeplinește în totalitate cerințele problemei noastre este deci:

$$A = L \cdot \Lambda^{1/2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \rho \frac{\sigma_2}{\sigma_1} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \sqrt{1-\rho^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ \rho \sigma_2 & \sigma_2 \sqrt{1-\rho^2} \end{bmatrix} \quad (6.174)$$

Relația (6.173) se poate scrie acum:

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ \rho \sigma_2 & \sigma_2 \sqrt{1-\rho^2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (6.175)$$

Dacă dorim ca distribuția în planul  $z$  să fie poziționată și în vectorul mediu  $m_z = [m_1, m_2]^T$  atunci avem:

$$\begin{cases} z_1 = m_1 + \sigma_1 \cdot x_1 \\ z_2 = m_2 + \rho \cdot \sigma_2 \cdot x_1 + \sqrt{1-\rho^2} \cdot \sigma_2 \cdot x_2 \end{cases} \quad (6.176)$$

### 6.6.3. Interpretarea descompunerii LU și aplicații

Deoarece în cazul unei descompunerii de forma  $C_x = L \cdot D_L \cdot L^{*T}$  (vezi relația (6.133)) a unei matrici de covarianță, matricea transformării din spațiul  $x$  în spațiul  $y$  este  $L^{-1}$ , pentru a interpreta semnificația acestei transformate trebuie mai întâi să vedem ce formă va lua matricea transformării.

**Observația 6.18:** Înainte de a demonstra că transformata obținută în urma unei descompunerii *Cholesky* este una cauzală sau nu vom arăta mai întâi faptul că, întrucât  $L$  este o matrice inferior triunghiulară unitară, matricea  $L^{-1}$  prezintă și ea aceeași proprietate.

**Demonstrație:** Pentru a demonstra această proprietate ne vom folosi de metoda inducției. Să presupunem că această proprietate este valabilă pentru matricile de ordin  $d-1$ . În acest caz pentru o matrice inferior triunghiulară de dimensiune  $d$  putem scrie:

$$L_d^{-1} \cdot L_d = I \quad (6.177)$$



Din relația (6.179) se observă că orice componentă cu indicele  $k$ ,  $y_k$ , a vectorului  $y$  este o funcție de variabilele  $x_l$  pentru  $l \leq k$ , după cum se prezintă în relația de mai jos:

$$y_k = x_k + l_{k,k-1} \cdot x_{k-1} + l_{k,k-2} \cdot x_{k-2} + \dots + l_{k,2} \cdot x_2 + l_{k,1} \cdot x_1 \quad (6.180)$$

Dacă, de exemplu, elementele vectorului  $x$  ar fi eșantioane consecutive ale unei secvențe aleatoare, atunci  $L^{-1}$  ar reprezenta o **transformată cauzală**.

Așa după cum am spus în introducerea acestui subcapitol, o transformată  $LU$  poate fi deosebit de utilă în situații cum ar fi: calculul determinanților unor matrici, calculul inverselor matricelor nesingulare etc.

### 1. Calculul determinanților matricelor de covarianță

Toate matricile  $A$  inferior triunghiulare unitare au determinantul egal cu 1. Dacă descompunem matricea de covarianță  $C_x$  sub forma (6.133) și ținem cont că o matrice de tipul  $L$  este inferior triunghiulară unitară atunci vom avea:

$$|C_x| = |L| \cdot |D_L| \cdot |L^{*T}| = |D_L| = \prod_{k=1}^d d_{kk} \quad (6.181)$$

unde  $d_{kk}$  sunt elementele de pe diagonala principală a matricii  $D_L$ . Ecuația (6.181) este similară cu relația (6.34). Deoarece  $d_{kk}$  sunt momentele de ordin doi ale componentelor  $y_k$  ale vectorului aleator  $y$ , relația (6.181) arată că determinantul matricii de covarianță poate fi scris ca un produs al momentelor de ordin doi, respectiv, al varianțelor variabilelor aleatoare ce compun vectorul aleator  $y$ .

În cazul descompunerii matricii de corelație sau a celei de covarianță sub forma dată de descompunerea *Cholesky* (6.134):

$$C_x = L_C \cdot L_C^{*T} \quad (6.182)$$

observăm din relația (6.146) că determinantul matricii de covarianță (corelație) a unui set de date este egal cu produsul pătratelor elementelor de pe diagonala principală a matricii  $L_C$ , respectiv:

$$|C_x| = |D_L| = \prod_{k=1}^d l_{Ck,k}^2 \quad (6.183)$$



## 2. Calculul inversei unei matrici

Descompunerea în forma  $LU$  este utilizată, de asemenea, și în calculul inversei unei matrici generice  $A$  prin intermediul relației:

$$A^{-1} = U^{-1} \cdot L^{-1} \quad (6.184)$$

Algoritmul de calcul al inversei unei matrici prin intermediul transformatei  $LU$  este mai rapid decât cel standard, bazat pe algoritmul *Gauss-Jordan*, chiar dacă acest prim algoritm necesită la un loc: calculul transformatei  $LU$ , inversarea matricelor  $L$  și  $U$ , și, în final, înmulțirea matricelor inversate,  $U^{-1}$  și  $L^{-1}$ . În acest sens trebuie să ținem cont de faptul că forma triunghiulară a acestor matrici ușurează mult calculul inverselor matricelor  $L$  și  $U$ .

Dacă matricea generică  $A$  – a cărei inversă dorim să o calculăm – este, în plus, și simetrică și pozitiv definită atunci putem utiliza algoritmul *Cholesky*. Dacă luăm în considerare doar factorii termenilor cu puterea cea mai ridicată din polinomul ce descrie numărul de înmulțiri necesare finalizării algoritmului vom observa că pentru descompunerea de tip  $LU$  sunt necesare  $2 \cdot n^3/3$  înmulțiri în timp ce algoritmul de descompunere *Cholesky* necesită doar  $n^3/3$  înmulțiri [Happonen, 2005]. În concluzie, în momentul în care dorim să calculăm inversa unei matrici simetrice și pozitiv definite, așa cum este cazul matricelor de corelație și, respectiv, de covarianță, vom descompune, mai întâi, matricea respectivă prin intermediul algoritmului *Cholesky* și apoi vom calcula inversa produsului  $L_C \cdot L_C^{*T}$ . Pentru aceasta vom ține cont suplimentar de faptul că  $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$ , în acest mod fiind de ajuns să calculăm inversa doar pentru o matrice din cele două.

Diagonalizarea matricii de corelație prin descompunerea triunghiulară urmează o procedură identică, matricea de corelație ( $R_x$ ) putând fi pur și simplu substituită matricii de covarianță  $C_x$  în toate ecuațiile anterior prezentate. În acest caz componentele vectorului  $y$  definite de relația (6.140) ( $y = L^{-1} x$ ) nu vor mai fi necorelate ci ele vor fi *ortogonale*.

În multe situații practice este mai util să se înlăture media din setul de date. În acest caz diagonalizarea matricii de corelație coincide cu diagonalizarea matricii de covarianță (cele două matrici fiind identice) și, ca rezultat final, trăsăturile noului vector obținut prin transformata  $L^{-1}$  vor fi atât necorelate cât și ortogonale.

## 6.6.4. Utilizarea metodei de factorizare QR

### 1. Introducere

Metoda de factorizare de tip QR este o altă metodă de tip “rădăcină pătrată” care poate fi utilizată pentru diagonalizarea oricărui tip de matrice, deci și a matricei de corelație, respectiv, de covarianță. Când această metodă este aplicată matricei de date,  $X$ , se pot pune în evidență aceleași relații, din punct de vedere al complexității și încărcării computaționale care există între descompunerea prin metoda SVD și descompunerea unitară.

O **descompunere QR** a unei matrice reale  $A$ , cu  $A \in R^{m \times n}$  și  $m \geq n$ , este dată de relația:

$$A = Q \cdot R \quad (6.185)$$

În relația (6.185) matricea  $Q$ , de tip  $m \times n$ , este o matrice ce are coloanele ortogonale în timp ce matricea  $R$  este o matrice pătratică,  $n \times n$ , superior triunghiulară.

În mod similar putem obține o altă descompunere, mai generală, tot de tip QR, dată în acest caz de produsul dintre o matrice unitară  $Q$  de dimensiune  $m \times m$  și o matrice superior triunghiulară, de dimensiune  $m \times n$ .

### 2. Obținerea transformatei QR prin metoda Gram–Schmidt

Pentru obținerea descompunerii QR se cunosc mai mult metode precum teorema de ortogonalizare Gram–Schmidt [Horn, 1985], transformarea Householder [Cox, 1997], [Pothen, 1989] sau metoda de rotire Givens [Pothen, 1989]. Fiecare dintre aceste metode are avantajele și dezavantajele ei.

În cadrul acestei cărți se va prezenta doar metoda de ortogonalizare Gram–Schmidt, metodă cunoscută în general studenților și persoanelor ce au tangență cu profilurile electric, electronic, calculatoare și informatică. Metoda de ortogonalizare Gram–Schmidt, ce va fi utilizată în obținerea factorizării QR, va fi particularizată în cele ce urmează pentru matricea setului de date,  $X$ , a unui vector aleator  $x$ .

În această situație se pleacă de la matricea setului de date (dată de relația (5.236)) pe care o rescriem sub forma:

$$X = \begin{bmatrix} | & | & | \\ | & | & | \\ x_1 & x_2 & x_d \\ | & | & | \\ | & | & | \end{bmatrix} \quad (6.186)$$

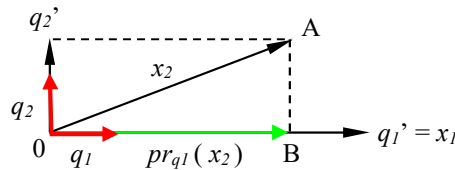
Vom presupune, în mod implicit, că numărul de linii  $K$  al matricii  $X$  este cel puțin egal cu numărul de coloane  $d$  – condiție satisfăcută în cazul problemelor reale în care dimensiunea unui vector aleator de trăsături este mai mică decât numărul vectorilor de trăsături ce compun setul de date –, și, în plus, coloanele sunt independente. Această ultimă condiție ne ajută în construirea, cu ajutorul procedurii Gram-Schmidt de ortogonalizare, a unui set de  $d$  vectori ortonormați  $q_1, q_2, \dots, q_d$ , ce vor avea același cardinal. Această procedură este descrisă în cele ce urmează.

Într-un prim pas se alege primul vector pe care ulterior îl ortonormăm. Acest vector  $q_1$  este o versiune normalizată a primei coloane:

$$q_1' = x_1, \quad q_1 = q_1' / \|q_1'\| \quad (6.187)$$

Pentru determinarea următorului vector din mulțimea vectorilor ortonormați, ne folosim de cea de a doua coloană a matricii  $X$  din care s-a înlăturat contribuția acesteia pe direcția lui  $q_1$ :

$$q_2' = x_2 - \underbrace{(x_2^{*T} q_1)}_{\text{proiecția lui } x_2 \text{ pe direcția } q_1} q_1 \quad (6.188)$$



**Figura 6.10.** Reprezentarea grafică a principiului ortogonalizării

Normalizând se obține în final și al doilea vector ortonormat:

$$q_2 = q_2' / \|q_2'\| \quad (6.189)$$

**Observația 6.19:** Pentru a obține proiecția pe  $q_1$  a vectorului  $x_2$ , notată cu  $pr_{q_1}(x_2)$  – **Figura 6.10**, știm că:

$$\begin{aligned} pr_{q_1}(x_2) &= \|OB\| = \|OA\| \cos(\alpha: x_2, q_1) \\ &= \|x_2\| \cos(\alpha: x_2, q_1) \end{aligned} \quad (6.190)$$

dar

$$\cos(\alpha : x_2, q_1) = \frac{x_2^{*T} q_1}{\|x_2\| \cdot \|q_1\|} \quad (6.191)$$

Știind că vectorul  $q_1$  face parte dintr-un set de vectori ortonormați (fiind, deci, de lungime 1) și introducând relația (6.191) în (6.190) obținem:

$$pr_{q_1}(x_2) = x_2^{*T} q_1 \quad (6.192)$$

În general al  $l$ -lea vector din setul vectorilor ortonormați este obținut din a  $l$ -a coloană a matricii  $X$ , văzută ca un vector, prin înlăturarea tuturor componentelor acestui vector de pe direcțiile vectorilor ortonormali anterior găsiți:

$$q_l' = x_l - \sum_{i=1}^{l-1} (x_l^{*T} q_i) q_i; \quad q_l = q_l' / \|q_l'\| \quad (6.193)$$

În ultima fază se normalizează și acest vector:

$$q_l = q_l' / \|q_l'\| \quad (6.194)$$

Relația (6.193) este aplicată în continuare pentru orice index  $l \leq d$ .

Datorită modului de obținere se observă că vectorii  $q_1$  și  $q_2$  se găsesc în același plan definit de  $x_1$  și  $x_2$ , vezi **Figura 6.10**. În mod similar  $q_1, q_2, \dots, q_l$  se găsesc în același spațiu definit de  $x_1, x_2, \dots, x_l$ . În concluzie putem scrie:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} | & | & | \\ q_1 & q_2 & q_d \\ | & | & | \end{bmatrix}}_Q = \underbrace{\begin{bmatrix} | & | & | \\ x_1 & x_2 & x_d \\ | & | & | \end{bmatrix}}_X \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \dots & \rho_{1d} \\ 0 & \rho_{22} & \dots & \rho_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{dd} \end{bmatrix}}_{R^{-1}} \quad (6.195)$$

În relația (6.195)  $R^{-1}$  este o matrice superior triunghiulară. Această ultimă ecuație poate fi rescrisă sub următoare formă, identică cu cea a unei factorizări QR:

$$X = QR = \begin{bmatrix} | & | & | & | \\ q_1 & q_2 & \dots & q_d \\ | & | & | & | \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1d} \\ 0 & r_{22} & \dots & r_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & r_{dd} \end{bmatrix} \quad (6.196)$$

În relația (6.196) matricea  $R$  este, de asemenea, o matrice superior triunghiulară în special datorită implicațiilor generate de relațiile (6.178) și (6.179) – relații ce dovedesc că o matrice triunghiulară de orice tip în urma aplicării inversei va deveni tot o matrice triunghiulară de același tip.

După cum am prezentat și anterior, în introducerea acestui subcapitol, relația (6.196) este doar o posibilă formă a factorizării QR; în această factorizare matricea datelor este egală cu produsul dintre o matrice dreptunghiulară, ale cărei coloane sunt ortogonale și o altă matrice pătratică superior triunghiulară. Această ecuație are interpretarea dată de observația că  $x_l$  are aceeași direcție cu  $q_l$ ,  $x_l$  și  $x_2$  se găsesc în planul determinat de  $q_l$  și  $q_2$ , iar  $x_l, x_2, \dots, x_l$  se află în subspațiul determinat de  $q_1, q_2, \dots, q_l$  pentru  $l \leq d$ . Coeficienții  $r_{ij}$  sunt dați de:

$$r_{ij} = q_i^{*T} x_j \quad (6.197)$$

În mod similar definiției și relației (6.185) putem obține o altă descompunere tot de tip QR dar care în acest caz este formată dintr-o matrice unitară  $Q$  de dimensiune  $m \times m$  și o matrice  $m \times n$  superior triunghiulară. Conform acestei descompuneri de tip QR se vor obține de asemenea două matrici de dimensiuni mai mari decât cele din relația (6.196) dar care le vor conține pe acele două – aceste matrici au fost prezentate anterior (matricea  $Q$  și matricea  $R$ ). Această descompunere ia forma:

$$X = \underbrace{[Q \ Q_0]}_{Q_1} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}}_{R_1} = \begin{bmatrix} | & | & & | & | & & | \\ | & | & & | & | & & | \\ | & | & & | & | & & | \\ \hline q_1 & q_2 & \dots & q_d & q_{d+1} & \dots & q_K \\ | & | & & | & | & & | \\ | & | & & | & | & & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1d} \\ 0 & r_{22} & \dots & r_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & r_{dd} \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (6.198)$$

În relația (6.198)  $Q_1$  este o matrice de tipul  $K \times K$  în timp ce matricea  $R_1$  are dimensiunea  $K \times d$  (evident că în situația problemelor reale avem întotdeauna  $K > d$ ). În sistemul (6.198) coloanele  $q_{d+1}, \dots, q_K$  sunt o mulțime de vectori ortonormali, ortogonali pe vectorii  $q_1, \dots, q_d$ . Astfel, primul termen al produsului este, de asemenea, o matrice unitară, în timp ce cea de a doua matrice (al doilea termen –  $R_1$ ) este o matrice superior triunghiulară.

### 3. Obținerea descompunerii LU prin factorizarea QR

Factorizarea QR poate fi utilizată pentru obținerea descompunerii *Cholesky* fără a mai calcula matricea de corelație. Matricea de corelație va fi estimată cu ajutorul relației (5.238). Produsul  $X^{*T}X$  poate fi scris folosind-ne de relația (6.196) și de proprietatea matricii  $Q$  (matrice ortonormată, având coloanele ortogonale) în forma:

$$X^{*T}X = R^{*T}Q^{*T}QR = R^{*T}R \quad (6.199)$$

Acest produs poartă numele de descompunerea *Cholesky*. În cazul în care  $\hat{R}_x$  este definită în forma (5.238), atunci din (6.199) avem:

$$\hat{R}_x = \frac{1}{K} R^{*T}R \quad (6.200)$$

Descompunând matricea  $\hat{R}_x$  în forma de mai jos:

$$\hat{R}_x = LD_L L^{*T} \quad (6.201)$$

și ținând cont ca descompunerea este unică, rezultă:

$$R^{*T} = \sqrt{K} LD_L^{1/2} \quad (6.202)$$

Toate aceste relații ce au drept obiectiv determinarea termenilor descompunerii (6.201) sunt oarecum similare demersului prezentat prin intermediul relațiilor (6.134), (6.135), (6.136) și (6.137).

Din relația (6.202) rezultă în mod direct relațiile:

$$D_L^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{K}} \text{diag}(R) \quad (6.203)$$

și

$$L = \frac{1}{\sqrt{K}} R^{*T} D_L^{-1/2} \quad (6.204)$$

Evident că ulterior se poate calcula  $D_L$  cu:

$$D_L = (D_L^{1/2})^2 \quad (6.205)$$

### 6.6.5. Descompunerea superior-inferior triunghiulară

Matricele de corelație sau de covarianță pot fi factorizate într-o formă alternativă, printr-o descompunere superior-inferior triunghiulară. Această descompunere este de forma:

$$C_x = U \cdot D_U \cdot U^{*T} \quad (6.206)$$

unde  $U$  este o matrice superior triunghiulară unitara în timp ce matricea  $D_U$  este una diagonală. În general  $U$  nu este aceeași matrice cu  $L^{*T}$ , din descompunerea inferior-superior triunghiulară. În mod similar  $D_U$  este diferită de  $D_L$ .

Din relația (6.206) avem:

$$U^{-1} R_x (U^{-1})^{*T} = D_U \quad (6.207)$$

În această situație transformata utilizată pentru diagonalizarea matricii de covarianță este:

$$y = U^{-1} x \quad (6.208)$$

care determină obținerea unui vector cu componente ortogonale, iar momentele de ordin doi ale componentelor (varianța) fiind chiar elementele de pe diagonala principală a matricii  $D_U$ . Deoarece  $U^{-1}$  este o matrice superior triunghiulară, această transformare este una necauzală a vectorului aleator  $x$ .