

PA081: Programování numerických výpočtů

9. Rozklady matic, singulární a vlastní hodnoty

Aleš Křenek

jaro 2012

Rozklad matic na singulární hodnoty

Základní tvrzení

- ▶ libovolnou reálnou (i komplexní) matici lze rozložit

$$\mathbf{A}_{M \times N} = \mathbf{U}_{M \times N} \cdot \Sigma_{N \times N} \cdot \mathbf{V}_{N \times N}^T \quad (= \mathbf{U}'_{M \times M} \cdot \Sigma'_{M \times N} \cdot \mathbf{V}'^T_{N \times N})$$

- ▶ \mathbf{U} je sloupcově ortogonální
 - ▶ až na nulové sloupce v případě $M \leq N$
- ▶ Σ diagonální a \mathbf{V} ortogonální
- ▶ rozklad je unikátní až na
 - ▶ současnou permutaci sloupců všech tří matic
 - ▶ lineární kombinaci sloupců \mathbf{U}, \mathbf{V} odpovídajících nulovým σ_i

Rozklad matic na singulární hodnoty

Geometrický význam

- ▶ **A** je složení transformací
 - ▶ rotace/zrcadlení \mathbf{V}^{-1}
 - ▶ zvětšení/zmenšení faktory σ_i ve směrech e_i , včetně degenerace ($\sigma_i = 0$)
 - ▶ rotace/zrcadlení a projekce do méně/více dimenzí **U**

Rozklad matic na singulární hodnoty

Geometrický význam

- ▶ **A** je složení transformací
 - ▶ rotace/zrcadlení \mathbf{V}^{-1}
 - ▶ zvětšení/zmenšení faktory σ_i ve směrech e_i , včetně degenerace ($\sigma_i = 0$)
 - ▶ rotace/zrcadlení a projekce do méně/více dimenzí **U**
- ▶ obor hodnot zobrazení **A**
 - ▶ sloupce **U** odpovídající **nenulovým** σ_i jsou jeho generátory

Rozklad matic na singulární hodnoty

Geometrický význam

- ▶ \mathbf{A} je složení transformací
 - ▶ rotace/zrcadlení \mathbf{V}^{-1}
 - ▶ zvětšení/zmenšení faktory σ_i ve směrech e_i , včetně degenerace ($\sigma_i = 0$)
 - ▶ rotace/zrcadlení a projekce do méně/více dimenzí \mathbf{U}
- ▶ obor hodnot zobrazení \mathbf{A}
 - ▶ sloupce \mathbf{U} odpovídající **nenulovým** σ_i jsou jeho generátory
- ▶ nulový prostor $\mathcal{N}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\}$
 - ▶ řádky \mathbf{V}^T odpovídající **nulovým** σ_i jsou jeho generátory

Rozklad matic na singulární hodnoty

Numerický význam

- ▶ „oddělení zrna od plev“
- ▶ sloupce U a V jsou kolmé a normované
- ▶ veškeré potenciální degenerace soustředěny do Σ
 - ▶ singularity A odpovídají nulovým σ_i
 - ▶ včetně numerických ($\sigma_i \approx 0$)
- ▶ numericky velmi stabilní algoritmus dekompozice
- ▶ lze použít na řešení systémů lineárních rovnic
 - ▶ $M < N$ a $M = N$ singulární: reprezentant řešení + generátor prostoru
 - ▶ $M > N$: nejbližší řešení

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M = N$

- ▶ řešení systému rovnic, resp. výpočet inverzní matice

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V}[\text{diag}(1/\sigma_i)]\mathbf{U}^T$$

- ▶ kdy to nejde
 - ▶ jedno nebo více σ_i je nulových - A byla singulární
 - ▶ $\sigma_{\min}/\sigma_{\max} < \epsilon$ (špatně podmíněná matice) - standardní metody řešení selhaly

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M = N$

- ▶ řešení systému rovnic, resp. výpočet inverzní matice

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V}[\text{diag}(1/\sigma_i)]\mathbf{U}^T$$

- ▶ kdy to nejde
 - ▶ jedno nebo více σ_i je nulových - A byla singulární
 - ▶ $\sigma_{\min}/\sigma_{\max} < \epsilon$ (špatně podmíněná matice) - standardní metody řešení selhaly

- ▶ označme

$$\Sigma' = \left[\text{diag} \left\{ \begin{array}{ll} 1/\sigma_i & \sigma_i \neq 0 \\ 0 & \sigma_i = 0 \end{array} \right. \right]$$

- ▶ rovnice $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ nemusí mít řešení, přesto zkusíme $\mathbf{x} = \mathbf{V}\Sigma'\mathbf{U}^T\mathbf{b}$

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M = N$

- ▶ hledáme nejbližší řešení, tj. minimalizujeme $|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}|$
- ▶ pro libovolné \mathbf{x}' je $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{x}') - \mathbf{b} = \mathbf{Ax} - \mathbf{b} + \mathbf{b}'$, kde $\mathbf{b}' = \mathbf{Ax}'$

$$\begin{aligned} |\mathbf{Ax} - \mathbf{b} + \mathbf{b}'| &= |(\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T)(\mathbf{V}\Sigma'\mathbf{U}^T\mathbf{b}) - \mathbf{b} + \mathbf{b}'| \\ &= |(\mathbf{U}\Sigma\Sigma'\mathbf{U}^T - I)\mathbf{b} + \mathbf{b}'| \\ &= |\mathbf{U}((\Sigma\Sigma' - I)\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{U}^T\mathbf{b}')| \\ &= |(\Sigma\Sigma' - I)\mathbf{U}^T\mathbf{b} + \mathbf{U}^T\mathbf{b}'| \end{aligned}$$

- ▶ $\Sigma\Sigma' - I$ je diagonální s nenulovými prvky pro $\sigma_i = 0$
- ▶ \mathbf{b}' je v oboru hodnot \mathbf{A} , tedy $\mathbf{U}^T\mathbf{b}'$ má nenulové prvky právě pro $\sigma_i \neq 0$
- ▶ minimum právě pro $\mathbf{b}' = 0$ a tedy i $\mathbf{x}' = 0$

Rozklad matic na singulární hodnoty

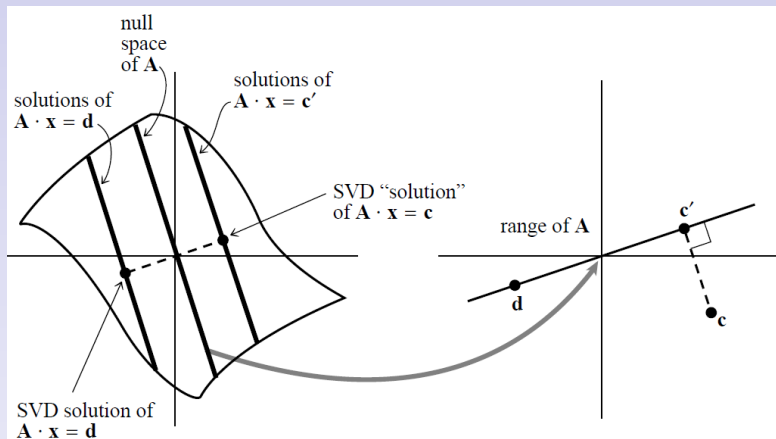
Použití pro $M = N$

PA081:
Programování
numerických
výpočtů

A. Křenek

Rozklad matic
na singulární
hodnoty

Vlastní
hodnoty a
vektory



Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M = N$ - prakticky

- ▶ singularitu \mathbf{A} detekujeme podle $\sigma_i = 0$
- ▶ vypočteme nejbližší řešení jako $\mathbf{x} = \mathbf{V}\Sigma'\mathbf{U}^T\mathbf{b}$
- ▶ dosazením ověříme, zda je to přesné řešení
 - ▶ když ne, víme, že přesné řešení neexistuje
 - ▶ máme nejbližší aproximaci

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M = N$ - prakticky

- ▶ singularitu \mathbf{A} detekujeme podle $\sigma_i = 0$
- ▶ vypočteme nejbližší řešení jako $\mathbf{x} = \mathbf{V}\Sigma'\mathbf{U}^T\mathbf{b}$
- ▶ dosazením ověříme, zda je to přesné řešení
 - ▶ když ne, víme, že přesné řešení neexistuje
 - ▶ máme nejbližší aproximaci
- ▶ špatně podmíněná matice $|\sigma_{\max}| \gg |\sigma_{\min}|$
 - ▶ lépe v Σ' vynulovat i taková σ_i
 - ▶ paradoxní - zahazujeme část vstupní informace
 - ▶ v praxi dává lepší výsledky - právě tento vstup má tendenci škodit
 - ▶ stanovení prahu $\sigma_i \approx 0$ není triviální

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M \neq N$

- ▶ méně rovnic, $M < N$
- ▶ nekonečně mnoho řešení
- ▶ rozklad na singulární hodnoty - $N - M$ nulových σ_i
 - ▶ nemusí být přesně nulové (numerické nepřesnosti)
 - ▶ může jich být více díky dalším singularitám
- ▶ Σ' vypočítáme vynulováním problematických σ_i
- ▶ přímo vypočteme reprezentativní řešení \mathbf{x}
 - ▶ včetně ověření, zda je skutečně řešením
- ▶ sloupce \mathbf{V} odpovídající nulovaným σ_i generují prostor dalších řešení

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M \neq N$

- ▶ více rovnic, $M > N$
- ▶ neexistuje přesné řešení, hledáme nejbližší aproximaci
- ▶ rozklad na singulární hodnoty
 - ▶ obecně nemusí dát žádná nulová σ_i
 - ▶ získáme nejbližší aproximaci řešení, viz naznačený důkaz

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M \neq N$

- ▶ více rovnic, $M > N$
- ▶ neexistuje přesné řešení, hledáme nejbližší aproximaci
- ▶ rozklad na singulární hodnoty
 - ▶ obecně nemusí dát žádná nulová σ_i
 - ▶ získáme nejbližší aproximaci řešení, viz naznačený důkaz
- ▶ (skoro) nulové singulární hodnoty
 - ▶ skrytá degenerace systému
 - ▶ může vést na jedno nebo i více přesných řešení

Rozklad matic na singulární hodnoty

Použití pro $M \neq N$

- ▶ více rovnic, $M > N$
- ▶ neexistuje přesné řešení, hledáme nejbližší aproximaci
- ▶ rozklad na singulární hodnoty
 - ▶ obecně nemusí dát žádná nulová σ_i
 - ▶ získáme nejbližší aproximaci řešení, viz naznačený důkaz
- ▶ (skoro) nulové singulární hodnoty
 - ▶ skrytá degenerace systému
 - ▶ může vést na jedno nebo i více přesných řešení
- ▶ velmi malé singulární hodnoty
 - ▶ ukazují na nízkou citlivost problému
 - ▶ právě ve směrech odpovídajících sloupců \mathbf{V}
 - ▶ zpravidla lépe vynulovat v Σ'

Rozklad matic na singulární hodnoty

Aproximace matic

- ▶ původní matici lze vyjádřit

$$A_{ij} = \sum_k \sigma_k U_{ik} V_{jk}$$

- ▶ je-li většina σ_i skoro nulových
- ▶ má smysl ukládat jen několik sloupců \mathbf{U} a \mathbf{V}
 - ▶ stále dostáváme poměrně přesnou aproximaci \mathbf{A}
- ▶ násobení \mathbf{Ax} je výrazně efektivnější – $K(M + N)$ operací

Rozklad matic na singulární hodnoty

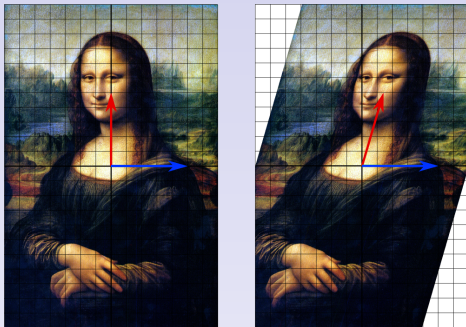
Algoritmus

- ▶ numericky stabilní implementace postupu v důkazu věty
- ▶ využívá řadu pomocných tvrzení
- ▶ relativně komplikovaný, ale přímočarý
- ▶ výjimečně stabilní
 - ▶ zaměření na vytažení problematických vlastností A do Σ
- ▶ použijeme existující implementaci :-)
 - ▶ už to za nás jednou někdo udělal
 - ▶ další vylepšující triky dodavatelů knihoven
 - ▶ nezbavuje to odpovědnosti za interpretaci výsledku
- ▶ původní algoritmus Golub a Reinsch, *Singular value decomposition and least squares solutions*, 1970

Vlastní hodnoty a vektory

- ▶ vlastní hodnoty a vektory matice (transformace)

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$



- ▶ více viz kursy lineární algebry

- ▶ numericky velmi nepříjemný problém
- ▶ ještě jasnější případ, kdy sáhnout k hotovým řešením
- ▶ různé varianty pro různé případy
 - ▶ reálné a komplexní
 - ▶ vlastní hodnoty, vektory, obojí
 - ▶ různé speciální typy matic
- ▶ vztah k singulárním hodnotám
 - ▶ sloupce \mathbf{U} v SVD jsou vlastní vektory $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$
 - ▶ nenulové singulární hodnoty jsou odmocniny nenulových vlastních hodnot $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$

Vlastní hodnoty a vektory

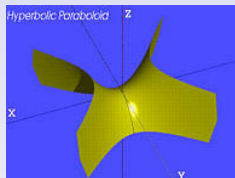
Použití

- ▶ PA081
 - ▶ hledání kořenů polynomů
 - ▶ superpozice množiny bodů

Vlastní hodnoty a vektory

Použití

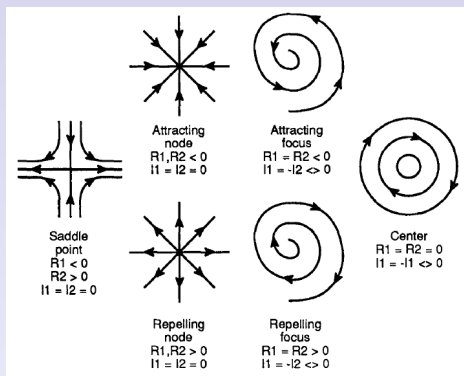
- ▶ PA081
 - ▶ hledání kořenů polynomů
 - ▶ superpozice množiny bodů
- ▶ kritické body funkce více proměnných
 - ▶ první parciální derivace jsou nulové
 - ▶ Hessián (matice druhých parciálních derivací) určuje aproximaci kvadrikou v daném bodě
 - ▶ symetrická matice - reálné hodnoty, ortonormální vektory
 - ▶ extrémy - všechny λ kladné, sedla - některé záporné
 - ▶ absolutní hodnoty λ určují tvar, vektory orientaci



Vlastní hodnoty a vektory

Použití

- ▶ kritické body vektorového pole
 - ▶ velikost vektoru je nulová
 - ▶ Jakobián (matice prvních partiálních derivací)



Vlastní hodnoty a vektory

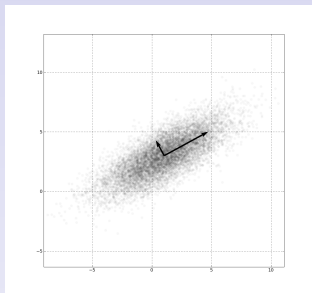
Použití

- ▶ Schrödingerova rovnice
 - ▶ řešení a interpretace speciálních případů

Vlastní hodnoty a vektory

Použití

- ▶ Schrödingerova rovnice
 - ▶ řešení a interpretace speciálních případů
- ▶ statistika – hlavní komponenty
 - ▶ charakteristika korelace veličin



Vlastní hodnoty a vektory

Použití

- ▶ zpracování obrazu
 - ▶ obrázky obličejů
 - ▶ např. 200×200 pixelů
 - ▶ vektory o 40.000 dimenzích
 - ▶ vlastní vektory matice kovariance
 - ▶ významnější lze použít jako generátory
 - ▶ použití při rozpoznávání tváří

