Optimalizace

Singulární rozklad (SVD)

Tomáš Kroupa   Tomáš Werner

2024

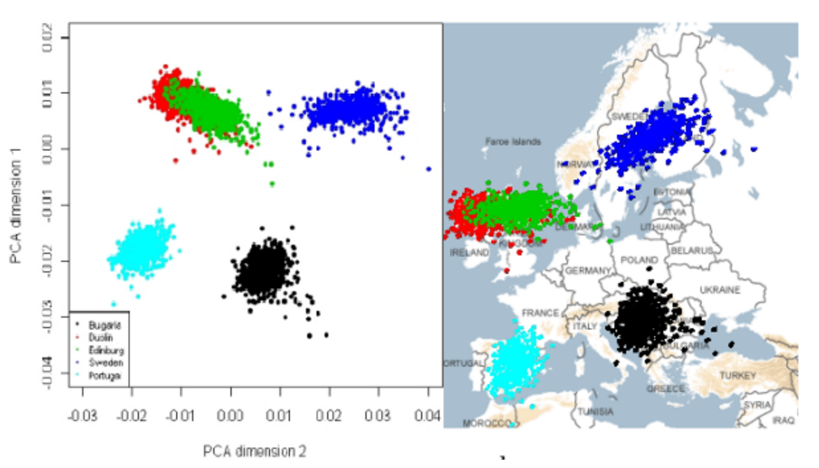
Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

K čemu slouží SVD

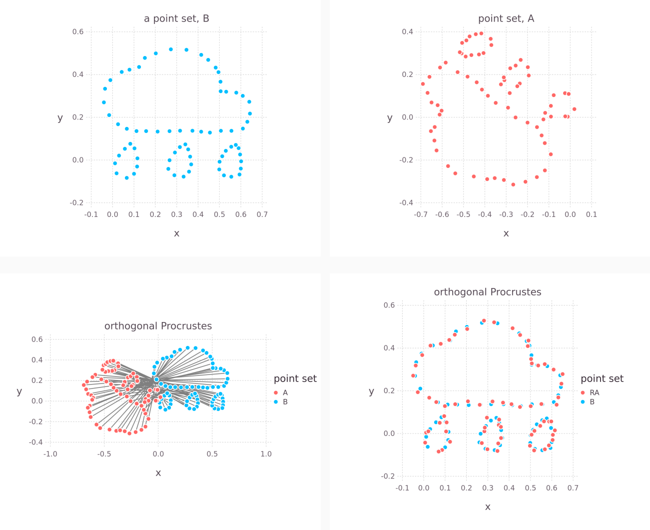
- Řešení PCA
- Matici nižší hodnosti (low rank approximation)
- Rozpoznávání obličejů (eigenfaces)
- Ortogonální Prokrustův problém
- Latentní sémantická analýza
- Nástroj pro numerické výpočty

PCA

Databáze genomu ($m \approx 200\,000$ proměnných) pro $n = 1\,400$ Evropanů byla promítnuta na $k = 2$ hlavní komponenty:



Point Cloud Alignment



https://simonensemble.github.io/posts/2018-10-27-orthogonal-procrustes/

SVD teoreticky

Singulární rozklad matice

Věta (Existence SVD)

Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\mathsf{T} = s_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^\mathsf{T} + \cdots + s_p \mathbf{u}_p \mathbf{v}_p^\mathsf{T},$$

kde $p = \min\{m, n\}$, diagonální matice $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ má na diagonále singulární čísla $s_1 \geq \cdots \geq s_p \geq 0$ a matice

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_p \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times p}, \qquad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 \cdots \mathbf{v}_p \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times p}$$

mají ortonormální sloupce zvané levé/pravé singulární vektory.

Různé verze SVD

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^{\top}$$

Redukované SVD

$\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times p}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times p}$

Plné SVD

$\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Rank-minimální SVD

$\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times r}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{r \times r}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times r}$, kde $r := \operatorname{rank} \mathbf{A} \leq p$

Protože $r = \operatorname{rank} \mathbf{S}$, číslo r je počet nenulových singulárních čísel.

Příklad: SVD úzké matice

$m = 3, n = 2$

Redukované i rank-minimální SVD

$p = r = 2$

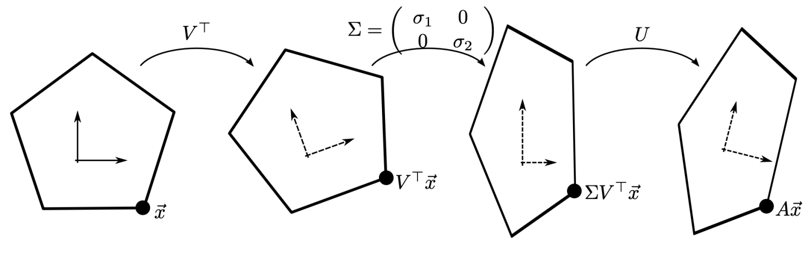
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Plné SVD

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} & 0 & -\frac{\sqrt{6}}{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

SVD geometricky

Efekt SVD matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ na vektor $\mathbf{x}$ si lze představit takto:



Obrázek: *Solomon - Numerical Algorithms*

Speciálně: $\mathbf{A}\mathbf{v}_i = s_i \mathbf{u}_i$

Jak souvisí singulární čísla s vlastními čísly?

Vlastní čísla matic $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top$ a $\mathbf{A}^\top\mathbf{A}$

Z rank-minimálního SVD matice $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\top$ dostaneme

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^\top = \mathbf{U}\mathbf{S}^2\mathbf{U}^\top \qquad \text{a} \qquad \mathbf{A}^\top\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{S}^2\mathbf{V}^\top.$$

To jsou spektrální rozklady se stejnou diagonální maticí $\mathbf{S}^2$.

- Matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top$ a $\mathbf{A}^\top\mathbf{A}$ mají stejná kladná vlastní čísla

$$\lambda_1 = s_1^2, \dots, \lambda_r = s_r^2$$

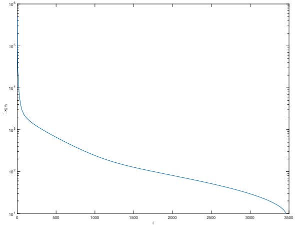
- Levé singulární vektory $\mathbf{u}_i$ jsou vlastní vektory matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top$
- Pravé singulární vektory $\mathbf{v}_i$ jsou vlastní vektory matice $\mathbf{A}^\top\mathbf{A}$

Singulární čísla některých matic

- Ortogonální matice má všechna singulární čísla rovna 1
- Hilbertova matice $\mathbf{A} = \left[\frac{1}{i+j-1}\right]_{ij}$ řádu n je regulární a např. pro $n = 100$ platí

$$s_1 = 2.1827, \ldots, s_{100} \approx 10^{-17}$$

- Černobílý obrázek bígla je matice 3456×4608 s plnou řádkovou hodností, singulární čísla jsou v grafu s $\log_{10}$ stupnicí



Vlastnosti SVD

- SVD existuje pro *libovolnou* matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Pro jeho výpočet se používají specializované metody, převod na spektrální rozklad není výpočetní vhodný
- Počet nenulových singulárních čísel matice $\mathbf{A} = \operatorname{rank} \mathbf{A}$, ale spíše se pro malé $\varepsilon > 0$ uvažuje numerický rank

$$\max \{ i \mid s_i > \varepsilon \}$$

- V numerických výpočtech je důležitou charakteristikou stability číslo podmíněnosti matice $\mathbf{A}$, což je poměr

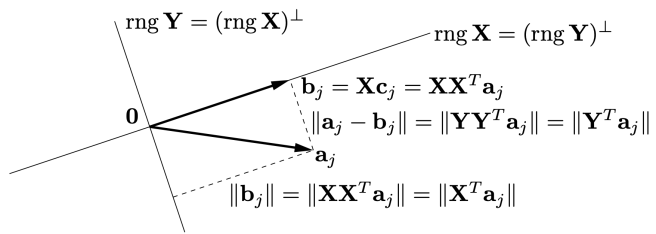
$$\frac{s_1}{s_r}$$

Aplikace SVD

Nejbližší matice nižší hodnosti pomocí řešení PCA

Low rank approximation pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$

$$\min\left\{\|\mathbf{A}-\mathbf{B}\|^2 \mid \mathbf{B}\in\mathbb{R}^{m\times n},\ \operatorname{rank}\mathbf{B}\le k\right\}$$



Minimum je $\mathbf{B}^* = \mathbf{X}\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{A}$, kde $\mathbf{X} = [\mathbf{v}_1\cdots\mathbf{v}_k]$ je matice vlastních vektorů odpovídajících k největším vlastním číslům matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^\mathsf{T}$.

Nejbližší matice nižší hodnosti pomocí SVD

$$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \;\; \mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\mathsf{T}, \;\; s_1 \geq \cdots \geq s_p, \;\; p = \min\{m, n\}$$

Věta (Eckart-Young)

Nechť $k \leq p$. Řešením úlohy

$$\min\left\{\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|^2 \mid \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \operatorname{rank} \mathbf{B} \leq k\right\}$$

je matice

$$\mathbf{B}^* = \mathbf{U}\mathbf{S}_k\mathbf{V}^\mathsf{T} = s_1\mathbf{u}_1\mathbf{v}_1^\mathsf{T} + \cdots + s_k\mathbf{u}_k\mathbf{v}_k^\mathsf{T},$$

kde $\mathbf{S}_k = \operatorname{diag}(s_1, \ldots, s_k, \mathbf{0}) \in \mathbb{R}^{p \times p}$.

Měříme kvalitu aproximace

Tvrzení

Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ hodnosti r platí

$$\|\mathbf{A}\| = \sqrt{s_1^2 + \cdots + s_r^2}.$$

Relativní chybu aproximace matice $\mathbf{A}$ maticí $\mathbf{B}^*$ hodnosti nejvýše k určíme ze singulárních čísel matice $\mathbf{A}$:

- Pro $k = 1, \ldots, r-1$ dostaneme

$$\frac{\|\mathbf{A} - \mathbf{B}^*\|}{\|\mathbf{A}\|} = \sqrt{\frac{s_{k+1}^2 + \cdots + s_r^2}{s_1^2 + \cdots + s_r^2}}$$

- Pro $r \leq k \leq p$ triviálně platí $\mathbf{B}^* = \mathbf{A}$ a chyba je 0

Komprese obrázku bígla pomocí SVD

$k = 5$, chyba 17%, $5 \times (3456 + 4608)$

$k = 20$, chyba 9%, $20 \times (3456 + 4608)$

$k = 200$, chyba 4%, $200 \times (3456 + 4608)$

Originál 3456×4608

PCA pomocí SVD

Matice $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \dots \mathbf{a}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ve sloupcích datové vektory $\mathbf{a}_i$, předpokládáme $\bar{\mathbf{a}} = \mathbf{0}$. Promítáme je na podprostor dimenze k.

Řešení

1. Spočti redukované SVD $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$, kde $s_1 \geq \cdots \geq s_p$
2. Označ $\mathbf{X} = [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{m \times k}$
3. Levé singulární vektory $\mathbf{u}_i$ (vlastní vektory matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$) tvoří ortonormální bázi hledaného podprostoru dimenze k
4. Souřadnice promítnutých bodů jsou sloupce matice $\mathbf{X}^T\mathbf{A}$
5. Optimální hodnota úlohy (absolutní chyba) je $s_{k+1}^2 + \cdots + s_p^2$

Příklad (1)

$n = 3$ recenzenti hodnotí $m = 4$ filmy body $0, \ldots, 5$.
Po normalizaci průměry dostaneme $\mathbf{A}$ a kovarianční matici:

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 \\ 5 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1.67 & 0.67 & -2.33 \\ 1.67 & 1.67 & -3.33 \\ -1.67 & -1.67 & 3.33 \\ -0.67 & -1.67 & 2.33 \end{bmatrix}$$

$$\tfrac{1}{3}\mathbf{A}\mathbf{A}^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 2.89 & 3.89 & -3.89 & -2.56 \\ 3.89 & 5.56 & -5.56 & -3.89 \\ -3.89 & -5.56 & 5.56 & 3.89 \\ -2.56 & -3.89 & 3.89 & 2.89 \end{bmatrix}$$

Hodnoty kovariancí naznačují, že existují $k = 2$ typy filmů.

Příklad (2)

- Pomocí SVD matice $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\mathsf{T}$ dostaneme levé singulární vektory $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2\ \mathbf{u}_3]$, jsou seřazeny podle singulárních čísel $s_1 = 7.05$, $s_2 = 1$, $s_3 = 0$
- PCA pro $k = 2$: klademe $\mathbf{X} = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2]$ a matice souřadnic datových vektorů promítnutých do $\mathrm{span}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$ je

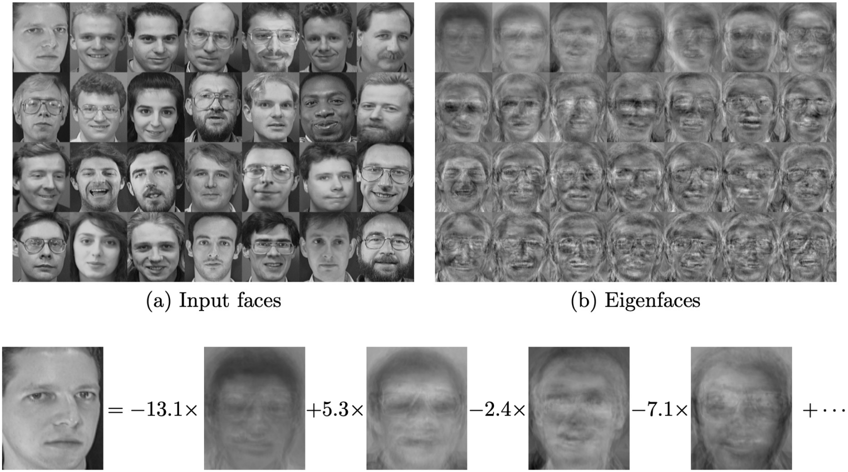
$$\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2.88 & -2.88 & 5.74 \\ -0.71 & 0.71 & 0 \end{bmatrix}$$

- Chyba aproximace je $s_3 = 0$

Eigenfaces (1)

- Datové vektory $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n$ jsou fotky obličejů (m pixelů)
- Předpoklad: Matice $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \ldots \mathbf{a}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ splňuje $\mathbf{A1} = \mathbf{0}$
- Matice levých singulárních vektorů $\mathbf{X} = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{m \times k}$ obsahuje k *charakteristických obličejů*
- Novou fotku $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$ reprezentujeme v nových souřadnicích $\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$ a nalezneme nejbližší sloupec v $\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{k \times n}$

Eigenfaces (2)



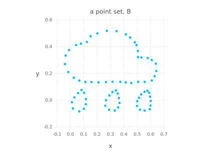
(a) Input faces

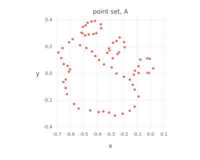
(b) Eigenfaces

(c) Projection

Obrázek: *Solomon - Numerical Algorithms*

Ortogonální Prokrustův problém (Point Cloud Alignment)





https://simonensemble.github.io/posts/2018-10-27-orthogonal-procrustes/

- Matice $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \dots \mathbf{a}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1 \dots \mathbf{b}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Hledáme ortogonální matici $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ minimalizující

$$\sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{X}\mathbf{a}_i - \mathbf{b}_i\|^2 = \|\mathbf{X}\mathbf{A} - \mathbf{B}\|^2$$

Optimální řešení

$\mathbf{X}^* = \mathbf{U}\mathbf{V}^\mathsf{T}$, kde $\mathbf{B}\mathbf{A}^\mathsf{T} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\mathsf{T}$ je redukované SVD