Optimalizace

Singulární rozklad (SVD)

Tomáš Kroupa Tomáš Werner

2025

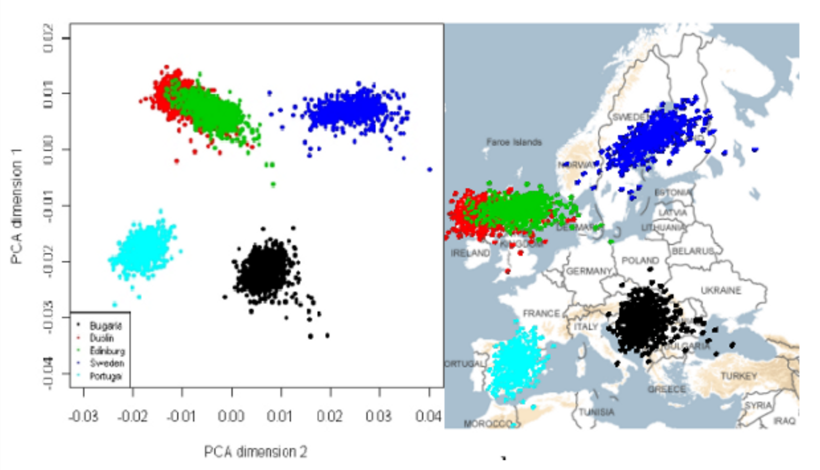
Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

K čemu slouží SVD

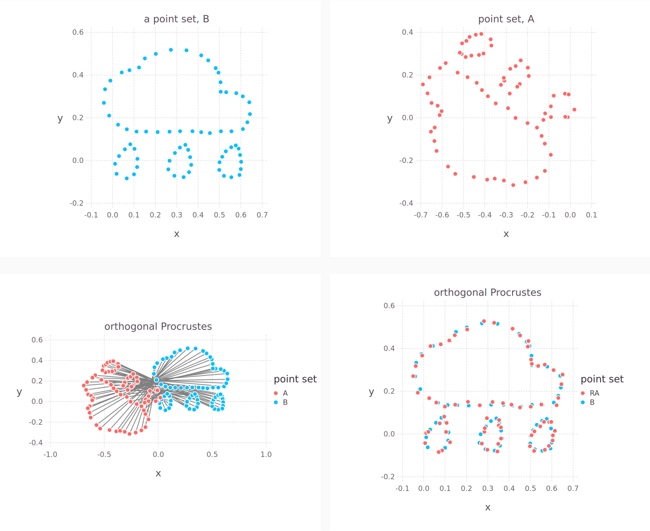
- PCA
- Aproximace maticí nižší hodnosti (low rank approximation)
- Rozpoznávání obličejů (eigenfaces)
- Ortogonální Prokrustův problém
- Latentní sémantická analýza
- Nástroj pro numerické výpočty

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

SVD: motivace

- Spektrální rozklad čtvercové symetrické matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, kde $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je ortogonální a $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je diagonální:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^\top$$

- Tedy lineární zobrazení $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ vyjádřené maticí $\mathbf{A}$ je až na transformaci souřadnic jen škálování s maticí $\mathbf{\Lambda}$

Otázka

Najdeme pro libovolnou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ortogonální matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a diagonální matici $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, aby platilo

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

SVD: konstrukce

Vstup: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad r := \operatorname{rank} \mathbf{A}, \quad p := \min\{m, n\}$

1. Spočti spektrální rozklad $\mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{V}^\top$
2. Definuj
$$s_i := \begin{cases} \sqrt{\lambda_i} & i = 1, \ldots, r \\ 0 & i = r+1, \ldots, p \end{cases}$$
a matici $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, má na diagonále $s_1, \ldots, s_p$ a jinde 0
3. Definuj $\mathbf{u}_i := \frac{1}{s_i} \mathbf{A} \mathbf{v}_i$ pro $i = 1, \ldots, r$
4. $[\mathbf{u}_1 \ldots \mathbf{u}_r] \in \mathbb{R}^{m \times r}$ doplň na ortogonální matici $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$

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

SVD: existence

Věta

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

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

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

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

mají ve sloupcích levé/pravé singulární vektory.

Různé verze SVD

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

Plná

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

Redukovaná

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

Rank-minimální

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

Příklad: SVD úzké matice

$m = 3, n = 2$

Redukované i rank-minimální

$p = r = 2$

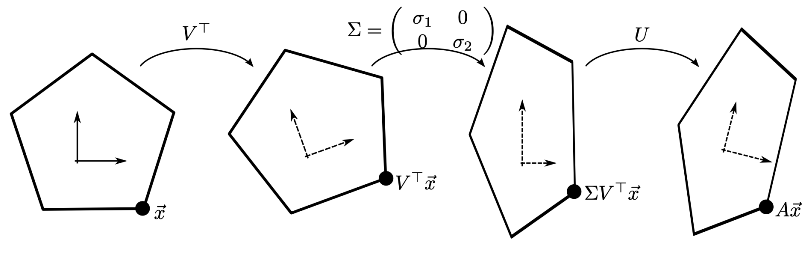
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2}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

Plné

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

SVD geometricky

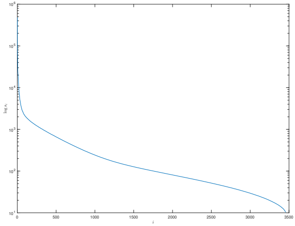
Lineární zobrazení s maticí $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ je až na transformace souřadnic v $\mathbb{R}^n$ i $\mathbb{R}^m$ jen škálování s maticí $\mathbf{S}$:



Obrázek: *Solomon - Numerical Algorithms*

Singulární čísla vybraných matic

- $s_1 = \cdots = s_n = 1$ pro ortogonální matici řádu n
- $s_i(\mathbf{A}) = |\lambda_i(\mathbf{A})|$ pro sym. matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, kde $i = 1 \ldots, n$, např. pro Hilbertovu matici $\mathbf{A} = \left[\frac{1}{i+j-1}\right]_{ij}$ řádu n a $n = 100$ 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



Aplikace SVD

Nejbližší matice nižší hodnosti pomocí SVD

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

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

$$\mathbf{B}^* = s_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^\mathsf{T} + \cdots + s_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^\mathsf{T}.$$

Norma matice a SVD

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 $k = r, \ldots, p$ 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 $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\top$
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 $\mathbf{A}\mathbf{A}^\top$) tvoří ortonormální bázi hledaného podprostoru dimenze k
4. Souřadnice promítnutých bodů jsou sloupce matice $\mathbf{X}^\top\mathbf{A}$
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:

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

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

Existují ve sledované databázi pouze $k = 2$ typy filmů?

Příklad (2)

- Matice $\mathbf{A}$ má singulární čísla $s_1 = 7.05$, $s_2 = 1$, $s_3 = 0$ a levé singulární vektory jsou $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$
- PCA pro $k = 2$: klademe $\mathbf{X} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2]$ a matice souřadnic datových vektorů promítnutých do $\operatorname{rng} \mathbf{X}$ je

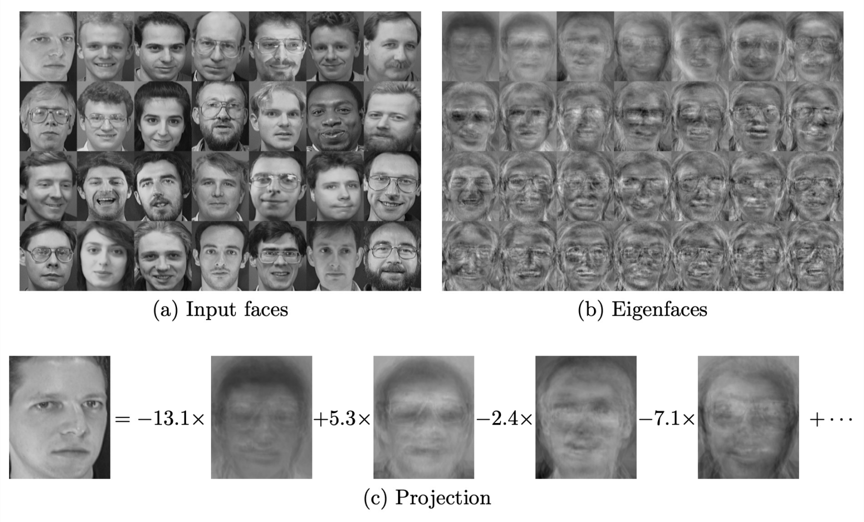
$$\mathbf{X}^\mathsf{T}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2.88 & -2.88 & 5.74 \\ -0.71 & 0.71 & 0 \end{bmatrix}$$

- Chyba aproximace je $s_3 = 0$

Eigenfaces (1)

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

Eigenfaces (2)



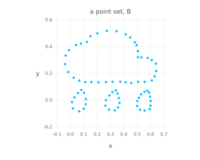
(a) Input faces

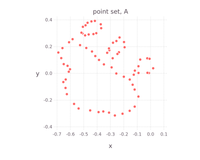
(b) Eigenfaces

(c) Projection

Obrázek: *Solomon - Numerical Algorithms*

Point Cloud Alignment (Ortogonální Prokrustův problém)





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