

# Optimalizace

## Singulární rozklad (SVD)

---

Tomáš Kroupa   Tomáš Werner

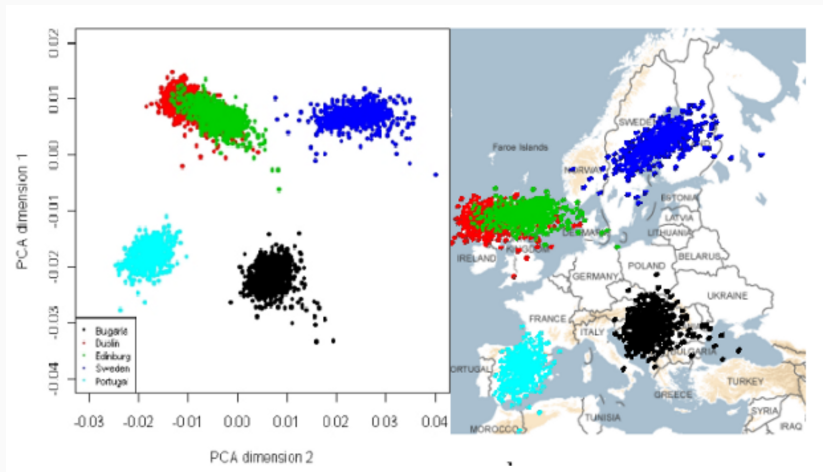
2024

Fakulta elektrotechnická  
ČVUT v Praze

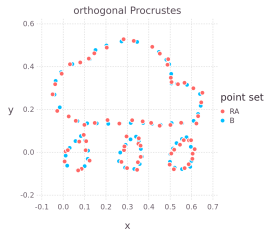
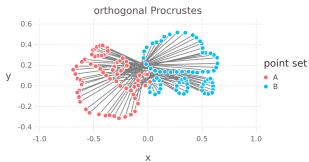
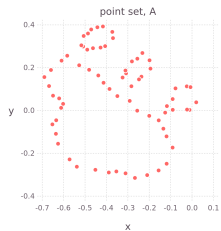
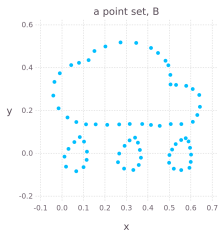
- Řešení PCA
- Matici nižší hodnosti (low rank approximation)
- Rozpoznávání obličejů (eigenfaces)
- Ortogonální Prokrustův problém
- Latentní sémantická analýza
- Nástroj pro numerické výpočty

# PCA

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



# Point Cloud Alignment



# SVD teoreticky

---

# Singulární rozklad matice

## Věta (Existence SVD)

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T = s_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \cdots + s_p \mathbf{u}_p \mathbf{v}_p^T,$$

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

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_p] \in \mathbb{R}^{m \times p}, \quad \mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \cdots \mathbf{v}_p] \in \mathbb{R}^{n \times p}$$

mají ortonormální sloupce zvané **levé/pravé singulární vektory**.

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

## 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

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

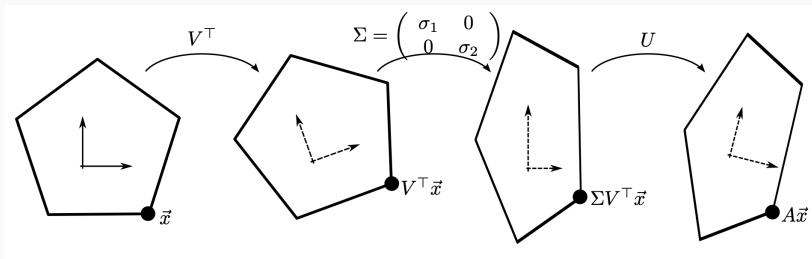
## Rank-minimální SVD

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

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

# 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:  $\mathbf{A} \mathbf{v}_j = s_j \mathbf{u}_j$



# Jak souvisí singulární čísla s vlastními čísly?

## Vlastní čísla matice $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$

Pomocí rank-minimálního SVD matice  $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$  dostaneme spektrální rozklad

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{S}^2\mathbf{V}^T.$$

Tedy kladná vlastní čísla matice  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  jsou  $\lambda_i = s_i^2$ .

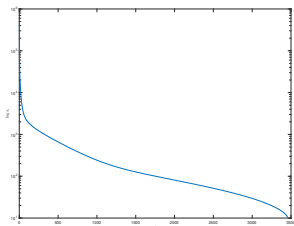
- Matice  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  a  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$  mají stejná kladná vlastní čísla
- Právě singulární vektory  $\mathbf{v}_i$  jsou vlastní vektory matice  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$
- Levé singulární vektory splňují  $\mathbf{u}_i = \frac{1}{s_i} \mathbf{A}\mathbf{v}_i$  a jsou to vlastní vektory matice  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$

## 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

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

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



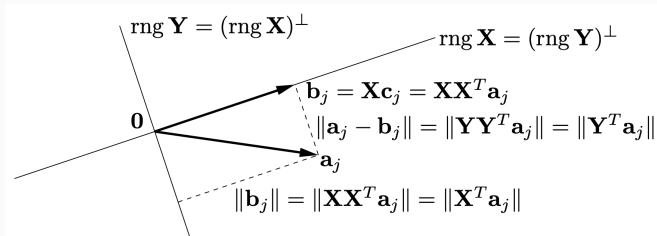
# Aplikace SVD

---

# Nejbližší matice nižší hodnosti pomocí řešení PCA

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

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



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

## Nejbližší matice nižší hodnosti pomocí SVD

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

### Věta (Eckart-Young)

Nechť  $k \leq p$ . Řešením úlohy

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

je matice

$$\mathbf{B}^* = \mathbf{US}_k \mathbf{V}^T = s_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \dots + s_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^T,$$

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

## 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  $k = 1, \dots, r - 1$  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

# Kompresa 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  $3456 \times 4608$

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  $\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$ , kde  $s_1 \geq \dots \geq s_p$
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  $\mathbf{AA}^T$ ) 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  $s_{k+1}^2 + \dots + s_p^2$



## Příklad (1)

$n = 3$  recenzenti hodnotí  $m = 4$  filmy body  $0, \dots, 5$ .

Po normalizaci průměry dostaneme  $\mathbf{A}$  a kovarianční matici:

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 \\ 5 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1.67 & 0.67 & -2.33 \\ 1.67 & 1.67 & -3.33 \\ -1.67 & -1.67 & 3.33 \\ -0.67 & -1.67 & 2.33 \end{bmatrix}$$
$$\frac{1}{3}\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 2.89 & 3.89 & -3.89 & -2.56 \\ 3.89 & 5.56 & -5.56 & -3.89 \\ -3.89 & -5.56 & 5.56 & 3.89 \\ -2.56 & -3.89 & 3.89 & 2.89 \end{bmatrix}$$

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

## Příklad (2)

- Pomocí SVD matice  $\mathbf{A} = \mathbf{USV}^T$  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  $\text{span}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$  je

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

- Chyba aproximace je  $s_3 = 0$

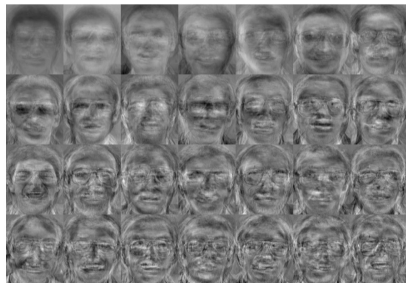
# Eigenfaces (1)

- Datové vektory  $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$  jsou fotky obličejů ( $m$  pixelů)
- Předpoklad: Matice  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \dots \mathbf{a}_n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$  splňuje  $\mathbf{A}\mathbf{1} = \mathbf{0}$
- Matice levých singulárních vektorů  $\mathbf{X} = [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_k] \in \mathbb{R}^{m \times k}$  obsahuje  $k$  *charakteristických obličejů*
- Novou fotku  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$  reprezentujeme v nových souřadnicích  $\mathbf{X}^T \mathbf{c} \in \mathbb{R}^k$  a nalezneme nejbližší sloupec  $\mathbf{v} \in \mathbf{X}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{k \times n}$

## Eigenfaces (2)



(a) Input faces



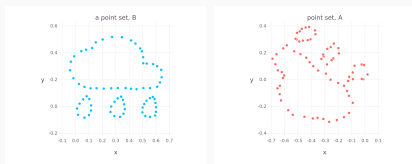
(b) Eigenfaces



(c) Projection

Obrázek: *Solomon - Numerical Algorithms*

# Ortogonalní 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

$\mathbf{X}^* = \mathbf{UV}^T$ , kde  $\mathbf{BA}^T = \mathbf{USV}^T$  je redukované SVD