PA081: Programování numerických výpočtů

9. Rozklady matic, singulární a vlastní hodnoty

Aleš Křenek

jaro 2011

Rozklad matic na singulární hodnoty

Základní tvrzení

- libovolnou reálnou (i komplexní) matici lze rozložit

$$\mathbf{A}_{M\times N} = \mathbf{U}_{M\times N}\cdot\Sigma_{N\times N}\cdot\mathbf{V}^T_{N\times N}\quad (= \mathbf{U}'_{M\times M}\cdot\Sigma'_{M\times N}\cdot{\mathbf{V}'}^T_{N\times N})$$

- **U** je sloupcově ortogonální
  - až na nulové sloupce v případě $M \leq N$
- Σ diagonální a **V** ortogonální
- rozklad je unikátní až na
  - současnou perumutaci 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 $\mathcal{N}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{Ax} = 0\}$
  - 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

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

- 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

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

- 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

$$\Sigma' = \left[\mathrm{diag} \begin{cases} 1/\sigma_i & \sigma_i \neq 0 \\ 0 & \sigma_i = 0 \end{cases} \right]$$

- 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 $M = N$

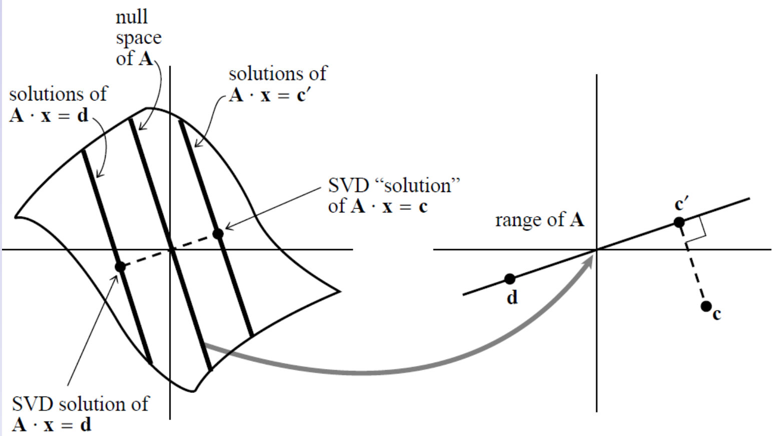
- hledáme nejbližší řešení, tj. minimalizujeme $|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}|$
- pro libovolné $\mathbf{x}'$ je $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{x}') - \mathbf{b} = \mathbf{Ax} - \mathbf{b} + \mathbf{b}'$, kde $\mathbf{b}' = \mathbf{Ax}'$

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

- $\Sigma\Sigma' - I$ je diagonální s nenulovými prvky pro $\sigma_i = 0$
- $\mathbf{b}'$ je v oboru hodnot $\mathbf{A}$, tedy $\mathbf{U}^T$ 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 $M = N$



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 **U** a **V**
  - stále dostáváme poměrně přesnou aproximaci **A**
- násobení **Ax** je výrazně efektivnější – $K(M+N)$ operací

Rozklad matic na singulární hodnoty

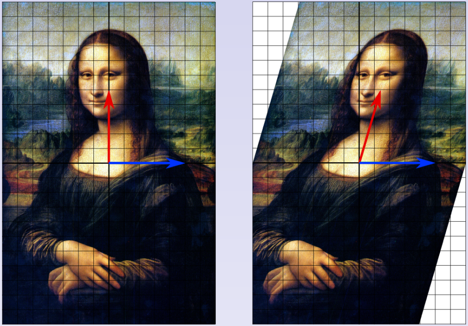
Algoritmus

- numericky stabilní implementace postupu v důkazu věty
- využívá řadu pomocných tvrzení
- relativně komplikovaný, ale přímočarý
- výjimečně stabilní
  - zaměření na vytažení problematických vlastností $\mathbf{A}$ 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)

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



- více viz kursy lineární algebry

Vlastní hodnoty a vektory

- 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 $\mathbf{AA}^T$
  - nenulové singulární hodnoty jsou odmocniny nenulových vlastních hodnot $\mathbf{AA}^T$

Vlastní hodnoty a vektory

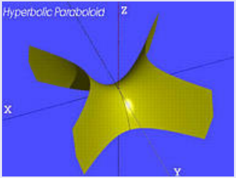
Použití

- PA081
  - hledání kořenů polynomů
  - superpozice množiny bodů

Vlastní hodnoty a vektory

Použití

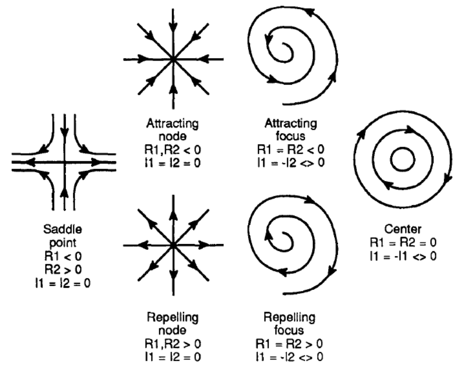
- PA081
  - hledání kořenů polynomů
  - superpozice množiny bodů
- kritické body funkce více proměnných
  - první parciální derivace jsou nulové
  - Hessián (matice druhých parciálních derivací) určuje aproximaci kvadrikou v daném bodě
  - symetrická matice – reálné hodnoty, ortonormální vektory
  - 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 parciálních derivací)



Vlastní hodnoty a vektory

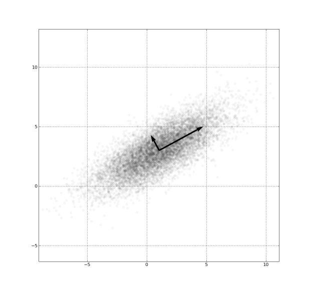
Použití

- 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