Algebra liniowa w analizie danych. Projekt badawczy 3. Rozkład macierzy według wartości osobliwych.

Gaspar Sekula, Kacper Rodziewicz, Michał Piechota, Aleksander Mróz

15.06.2023

Wstęp

Dobrze znany jest nam rozkład macierzy kwadratowych zwany diagonalizacją. Dokładniej, jeśli $A \in M_n^n(\mathbb{K})$ jest macierzą diagonalizowalną, to A można przedstawić jako iloczyn

$$A = PDP^{-1},$$

gdzie D jest macierzą diagonalną, a P to macierz zmiany bazy (na bazę złożoną z wartości własnych macierzy A).
Rozkład ten znajdował zastosowanie, między innymi, przy potęgowaniu macierzy. Atoli działa on tylko dla pewnych macierzy kwadratowych.
Okazuje się jednak, iż istnieje inny sposób rozkładu dowolnej macierzy, nawet **niekwadratowej**. Mowa tu o **rozkładzie macierzy według wartości osobliwych**, często nazywanym *rozkładem SVD* (akronim od ang. Singular Values Decomposition).
Dowolną macierz $M \in M_m^m(\mathbb{K})$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ lub $\mathbb{K} = \mathbb{C}$) możemy rozłożyć jako

$$M = U\Sigma V^*,$$

gdzie U to macierz unitarna $m \times m$,
Σ to prostokątna macierz $m \times n$ z nieujemnymi wartościami na przekątnej i pozostałymi współczynnikami równymi 0,
V to macierz unitarna $n \times n$.

Wartości osobliwe

Przedstawimy najważniejsze twierdzenia i definicje niezbędne do zrozumienia istoty wartości osobliwych i rozkładu SVD. Przyjmujemy, że ciało $\mathbb{K}$ jest ciałem liczb rzeczywistych lub zespolonych.

Twierdzenie 1. *Niech $A \in M_m^n(\mathbb{K})$. Macierz $A^*A \in M_n^n(\mathbb{K})$ jest nieujemnie określoną macierzą hermitowską. Ponadto wszystkie jej wartości własne są nieujemne.*

Dowód. Dla dowolnego x mamy

$$x^T A^* A \overline{x} = (\overline{A}x)^T \overline{(\overline{A}x)} = \langle \overline{A}x, \overline{A}x \rangle \geq 0,$$

gdzie $\langle , \rangle$ to standardowy iloczyn skalarny. Rozważmy macierz $(A^*A)^*$:

$$(A^*A)^* = A^*(A^*)^* = A^*A,$$

toteż A^*A jest hermitowska.
Niech λ będzie wartością własną macierzy A^*A i x odpowiadającym jej wektorem własnym. Wówczas

$$\lambda\langle x, x\rangle = \langle \lambda x, x\rangle = \langle A^*Ax, x\rangle = \langle Ax, Ax\rangle \geq 0.$$

Oczywiście, $\langle x, x\rangle \geq 0$, więc $\lambda \geq 0$. $\square$

Szczególnie ostatnie zdanie treści powyższego twierdzenia będzie miało niebagatelne znaczenie, bowiem...

Definicja 1. *Niech $A \in M_m^n(\mathbb{K})$. Wartościami osobliwymi macierzy A nazywamy pierwiastki kwadratowe z dodatnich wartości własnych macierzy A^*A.*

Twierdzenie 2. *Niech $A \in M_m^n(\mathbb{K})$. Istnieją unitarne macierze U i V, takie że*

$$U^*AV = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

gdzie $\sigma = diag(\sigma_1, ..., \sigma_k)$, gdzie σ_i, $i \in [k]$, są wszystkimi wartościami osobliwymi macierzy A uporządkowanymi od największej do najmniejszej.

Ciekawsze własności wartości osobliwych

Własność ⚀

Jeśli macierz A jest kwadratowa, to $|det(A)|$ jest iloczynem wartości osobliwych macierzy A.

Dowód. Oczywiste jest, że macierz A możemy przedstawić w postaci $A = UDV^*$, gdzie $U, D, V \in M_n^n(\mathbb{K})$, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ lub $\mathbb{K} = \mathbb{C}$.
Macierze U i V są unitarne, a D - diagonalna, mająca na przekątnej wartości osobliwe macierzy A lub ewentualne zera. Wobec tego prawdziwe są równości:

$$A^* = VD^*U^* = VDU^*,$$

$$AA^* = U \cdot D \cdot V^* \cdot V \cdot D \cdot U^* = UDDU^*.$$

Toteż

$$det(AA^*) = det(A) \cdot det(A^*) = det(A) \cdot \overline{det(A)} = |det(A)|^2 =$$
$$= det(U) \cdot (det(D))^2 \cdot (det(U^*) = (det(D))^2,$$

gdzie ostatnia równość zachodzi ponieważ $UU^* = I$, więc $det(U)det(U^*) = 1$. Ostatecznie otrzymujemy, że $|det(A)| = |det(D)| = det(D)$, a wyznacznik macierzy D to iloczyn wartości na diagonali, czyli wartości osobliwych.

$\square$

Własność ⚁

Jeśli P jest macierzą ortogonalną $m \times m$, to PA ma te same wartości osobliwe, co macierz A.

Dowód. Niech P będzie macierzą ortogonalną $m \times m$, $A \in M_m^n(\mathbb{K})$, $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ lub $\mathbb{K} = \mathbb{C}$. Korzystamy z rozkładu SVD i otrzymujemy, że

$$A = UDV^*,$$

stąd

$$PA = PUDV^*,$$

gdzie macierze U i V są unitarne, a D - diagonalna mająca na przekątnej wartości osobliwe macierzy A. Macierze P i U są macierzami unitarnymi, sprawdźmy zatem, czy PU również jest unitarna.

$$(PU)(PU)^* = PUU^*P^* = PP^* = I,$$

ponieważ $UU^* = I$ oraz $PP^* = I$. Więc PU jest unitarna. Niech $H := PU$. Wówczas $PA = HDV^*$, stąd

$$(PA)(PA)^* = HDV^*VD^*H^* = HDD^*H^*.$$

Podstawmy $\mathcal{H} := DD^*$.

$$HDD^*H^* = H\mathcal{H}H^* = H\mathcal{H}H^{-1}$$

Zauważmy, że $\mathcal{H}$ jest macierzą diagonalną, toteż elementy na przekątnej są wartościami własnymi macierzy $(PA)(PA)^*$. Ponadto na owej diagonali znajdują się wszystkie wartości osobliwe macierzy A podniesione do kwadratu i ewentualne 0, stąd wniosek, że wartości osobliwe macierzy PA i A są takie same. $\square$

Jak znaleźć rozkład według wartości osobliwych?

Niech $M \in M_m^n(\mathbb{K})$. Zauważmy, że

$$MM^* = (U\Sigma V^*)(U\Sigma V^*)^* = U\Sigma V^* V\Sigma U^* = U\Sigma^2 U^*$$

oraz że

$$M^*M = (U\Sigma V^*)^*(U\Sigma V^*) = V\Sigma U^* U\Sigma V^* = V\Sigma^2 V^*.$$

Z **Twierdzenia 1.** wiemy, że MM^* oraz M^*M są hermitowskie. Zgodnie z twierdzniem spektralnym, mają one ortogonalną bazę złożoną z wektorów własnych.
Szukane macierze U i V są macierzami baz ortogonalnych złożonych z wektorów własnych MM^* i M^*M, odpowiednio.
Wartości osobliwe to pierwiastki dodatnich współczynników z Σ^2.

Intuicyjnie o SVD

Niech $M \in M_m^m(\mathbb{R})$, $M = U\Sigma V^T$ i $\mathbb{F} : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ będzie operatorem o macierzy M. Wtedy rozkład SVD rozbija działanie $\mathbb{F}$ na obrót (V^T), rozciąganie przestrzeni (Σ) i znowu obrót (U).

Pozwala to znaleźć kierunek, w którym $\mathbb{R}^m$ jest najbardziej rozciągana przez $\mathbb{F}$.

Algorytm SVD

Pojawiły się definicje, twierdzenia, ciekawsze własności i ich dowody, czyli wystarczająco dużo teorii. Znajdą się tacy, co powiedzą, że ta teoria to tylko *Słowa, słowa, słowa, słowa* (Stanisław Wyspiański, *Wesele*, Poeta do Maryny, akt I, scena 10 / Maryna do Poety akt I, scena 15). Wyjasnimy więc, na czym polega algorytm rozkładu macierzy według wartości osobliwych. Paralelnie pokażemy na przykładzie sposób znajdowania rozkładu SVD.

Algorytm

Zademonstrujemy działanie algorytmu na przykładzie.

Niech $A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & -2 \end{pmatrix}$.
Najsampierw ustalamy macierze $B := AA^T$ oraz $C := A^TA$ (transponujemy bez sprzężania, ponieważ działamy w ciele liczb rzeczywistych).

$$B = AA^T = \begin{pmatrix} 17 & 8 \\ 8 & 17 \end{pmatrix}$$

Sprawnie obliczamy wartości własne macierzy B, korzystając z dobrze znanego wzoru $det(B - \lambda I) = 0$ i otrzymujemy $\lambda_1 = 25, \lambda_2 = 9$, stąd wartości osobliwe B to $\sigma_1 = \sqrt{25} = 5, \sigma_2 = \sqrt{9} = 3$.
Znajdziemy macierz V, czyli macierz bazy ortogonalnej złożonej z wektorów własnych macierzy $C = A^TA$. Wartościami własnymi $C = A^TA$ są 25, 9 i 0. Z symetryczności macierzy $C = A^TA$ wynika, że wektory własne są ortogonalne. Dla $\lambda = 25$ mamy:

$$A^TA - 25I = \begin{pmatrix} -12 & 12 & 2 \\ 12 & -12 & -2 \\ 2 & -2 & -17 \end{pmatrix}.$$

Gaussujemy i otrzymujemy $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$. Stąd unormowany wektor własny $v_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$. Analogicznie postępując dla $\lambda = 9$ znajdujemy $v_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{18} \\ -1/\sqrt{18} \\ 4/\sqrt{18} \end{pmatrix}$.

Wektor v_3 wyznaczymy, przyjrzywszy się v_1 i v_2. Niech $v_3 := \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$. Aby v_3 był ortogonalny, oczywiście w sensie standardowego iloczynu skalarnego, do v_1, musi zachodzić $\beta = -\alpha$, zatem $v_3 := \begin{pmatrix} \alpha \\ -\alpha \\ \gamma \end{pmatrix}$.

Rozważmy ortogonalność względem v_2. Mamy $v_2^Tv_3 = 0 \Leftrightarrow \frac{2\alpha}{\sqrt{18}} + \frac{4\gamma}{\sqrt{18}} = 0 \vee -\alpha = 2\gamma$. Zatem $v_3 := \begin{pmatrix} \alpha \\ -\alpha \\ \frac{-\alpha}{2} \end{pmatrix}$ i badamy, dla jakiej α wektor v_3 jest unormowany. Finalnie otrzymujemy $v_3 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{-2}{3} \\ \frac{-1}{3} \end{pmatrix}$.

Wobec tego macierz V^T wygląda następująco:

$$V^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{-1}{\sqrt{18}} & \frac{4}{\sqrt{18}} \\ \frac{2}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{-1}{3} \end{pmatrix}.$$

Mamy więc

$$A = U\Sigma V^T = U \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{-1}{\sqrt{18}} & \frac{4}{\sqrt{18}} \\ \frac{2}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{-1}{3} \end{pmatrix}.$$

Pozostało nam wyznaczyć macierz U. Wykonując pracochłonne rachunki lub stosując wzór $\sigma u_i = Av_i$ lub umiejętnie posiłkując się *Wolframem*, wyznaczamy szukaną macierz $U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$.

Możemy więc się pochwalić rozkładem SVD macierzy A:

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{18}} & \frac{-1}{\sqrt{18}} & \frac{4}{\sqrt{18}} \\ \frac{2}{3} & \frac{-2}{3} & \frac{-1}{3} \end{pmatrix}.$$

Implementacja programistyczna

Poniżej zamieszczamy naszą implementację programistyczną algorytmu SVD. Oczywiście, istnieje już gotowa funkcja, ale jednolinijkowy kod nie byłby wyzwaniem! Wiele kroków opisanego powyżej algorytmu można programistycznie wykonać szybciej, czego nie unikaliśmy. Naszą funkcję `singularValuesDecomposition` zaimplementowaliśmy w języku `Python`, w szczególności przy użyciu biblioteki `linalg` z pakietu `NumPy`. Kod wraz z przykładami znajduje się w repozytorium.

```
def singularValuesDecomposition(A):

     B = np.dot(A, A.T)
    C = np.dot(A.T, A)

    eigenvaluesB, eigenvectorsB = np.linalg.eig(B)
    eigenvaluesB = np.sqrt(np.abs(eigenvaluesB))
    eigenvectorsB = eigenvectorsB[:, np.argsort(-eigenvaluesB)]
    eigenvaluesB = np.sort(eigenvaluesB)[::-1]

    eigenvaluesC, eigenvectorsC = np.linalg.eig(C)
    eigenvectorsC = eigenvectorsC[:, np.argsort(-eigenvaluesC)]

    m, n = A.shape
    S = np.zeros((m, n))
    min_dim = min(m, n)
    S[:min_dim, :min_dim] = np.diag(eigenvaluesB)

    eigenvectorsB[np.abs(eigenvectorsB) < 1e-15] = 0
    eigenvectorsC[np.abs(eigenvectorsC) < 1e-15] = 0
    return eigenvectorsB, S, eigenvectorsC.T
```

Czy nasz kod działa?

Tak, działa. Dla macierzy $A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & -2 \end{pmatrix}$ z poprzedniego podrozdziału wynik wygląda następująco:

```
U:
[[ 0.70710678 -0.70710678]
 [ 0.70710678  0.70710678]]
```

```
S:
```

```
[[5.  0.  0.]
 [0.  3.  0.]]
---
V:
[[-0.70710678  -0.70710678   0.          ]
 [ 0.23570226  -0.23570226   0.94280904]
 [-0.66666667   0.66666667   0.33333333]]
```

Zatem co do szalenie małego ϵ wyniki się zgadzają ☻.

Bibliografia

1. Koźniewski T., *Wykłady z algebry liniowej II*, Warszawa 2006;
2. Śwircz T., *Algebra liniowa z geometrią analityczną*, Oficyna Wydawnicza PW, Warszawa 1996;
3. Singular value decomposition, Wikipedia, dostęp w dniu 10.06.2023;
4. Notatki z zajeć dot. SVD z uniwersytetu Massachusetts Institute of Technology, dostęp w dniu 10.06.2023.