# Rozkład SVD macierzy

Jakub Kuciński Karol Kuczmarz

18 maja 2020

# Spis treści

# Wektor własny i wartość własna

## Definicja

Niech $A \in M_{n \times n}$. Wektor $V \in \mathbb{R}^n$ nazywamy **wektorem własnym** $A$, jeżeli

$$(\exists \lambda \in \mathbb{R})(Av = \lambda v)$$

# Wektor własny i wartość własna

## Definicja

Niech $A \in M_{n \times n}$. Wektor $V \in \mathbb{R}^n$ nazywamy **wektorem własnym** $A$, jeżeli

$$(\exists \lambda \in \mathbb{R})(Av = \lambda v)$$

## Definicja

**Wartością własną** macierzy $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R}$ nazywamy $\lambda \in \mathbb{R}$ takie, że istnieje niezerowy wektor własny dla $\lambda$ (tzn. $(\exists v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\})(Av = \lambda v)$).

# Diagonalizacja macierzy

## Twierdzenie

Jeżeli macierz $A \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ ma $n$ liniowo niezależnych wektorów własnych $v_1, \ldots, v_n \in \mathbb{R}^n$ i $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ to odpowiadające im wartości własne, to macierz $A$ możemy przedstawić jako

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

gdzie:

- $P = (v_1, \ldots, v_n)$
- $D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$ diagonalna.

# Diagonalizacja macierzy

**Uwaga**

Nie wszystkie macierze można diagonalizować. Można przejść w liczby zespolone, ale dalej możemy mieć wielokrotne wartości własne. Uogólnienie – *Twierdzenie Jordana*.

# Standardowy iloczyn skalarny

Niech $v, u \in \mathbb{R}^n$.

$$u \circ v = \sum_{i=1}^{n} u_i \cdot v_i = u^T v$$

# Dodatkowe pojęcia cz. 1

**Definicja**

Macierz kwadratową $A \in M_{n\times n}(\mathbb{R})$ nazywamy macierzą ortogonalną, jeżeli zachodzi $AA^T = A^T A = I$.

**Definicja**

Zbiór wektorów będący bazą przestrzeni $\mathbb{R}^n$ taki, że wektory są parami prostopadłe i mające długość 1 nazywamy bazą ortonormalną.

# Dodatkowe pojęcia cz. 2

## Uwaga

Ortogonalności macierzy są równoważne warunki:

- kolumny $A$ stanowią bazę ortonormalną $\mathbb{R}^n$
- wiersze $A$ stanowią bazę ortonormalną $\mathbb{R}^n$

# Macierze symetryczne

Do rozkładu SVD potrzebne nam będą szczególnie macierze symetryczne, czyli takie, które są niezmiennicze na operację transpozycji ($A = A^T$). Mają one kilka ciekawych własności.

# Twierdzenie spektralne

**Twierdzenie**

Każda symetryczna macierz $A \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ diagonalizuje się w pewnej bazie ortonormalnej i wszystkie jej wartości własne są rzeczywiste.

# Dodatnia określoność

## Definicja

Macierz symetryczna $A \in M_{n\times n}(\mathbb{R})$ jest dodatnio określona, jeżeli dla każdego $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ zachodzi

$$v \circ Av > 0$$

Jeżeli nierówność jest słaba, to mówimy, że macierz jest dodatnio półokreślona.

# Dodatnia określoność

Dodatnia określoność (półokreśloność) jest równoznaczna ze wszystkimi dodatnimi (nieujemnymi) wartościami własnymi macierzy. Z twierdzenia spektralnego mamy $A = PDP^T$. Wtedy

$$v \circ Av = v \circ PDP^T v = (P^T v) \circ D(P^T v) > 0$$

# Dodatnia określoność

Dodatnia określoność (półokreśloność) jest równoznaczna ze wszystkimi dodatnimi (nieujemnymi) wartościami własnymi macierzy. Z twierdzenia spektralnego mamy $A = PDP^T$. Wtedy

$$v \circ Av = v \circ PDP^T v = (P^T v) \circ D(P^T v) > 0$$

Skoro $P^T$ jest ortogonalna, to jest macierzą zmiany bazy, czyli powyższa równość jest tożsama z

$$v \circ Dv > 0$$

$$v \circ Dv = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot v_i^2$$

# Własności macierzy $A^T A$ i $AA^T$

**Lemat**

Dla dowolnej macierzy $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$ macierze $AA^T$ i $A^T A$ są symetryczne i dodatnio półokreślone.

# Własności macierzy $A^T A$ i $AA^T$

## Lemat

Dla dowolnej macierzy $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$ macierze $AA^T$ i $A^T A$ są symetryczne i dodatnio półokreślone.

## Dowód

Macierze $A^T A$ i $AA^T$ są odpowiednio wymiaru $n \times n$ i $m \times m$. Najpierw pokażemy symetryczność.

$$(AA^T)^T = (A^T)^T A^T = AA^T$$

$$(A^T A)^T = A^T (A^T)^T = A^T A$$

# Własności macierzy $A^T A$ i $AA^T$

## Dowód cd.

Pokażemy dodatnią półokreśloność $A^T A$, dowód dla macierzy $AA^T$ jest analogiczny. Weźmy dowolny wektor $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$.

$$v \circ A^T A v = Av \circ Av \geq 0$$

z definicji iloczynu skalarnego.

# Spis treści

# Twierdzenie

## Twierdzenie

Każdą macierz $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$ można przedstawić w postaci iloczynu $A = U \Sigma V^T$, gdzie:

# Twierdzenie

## Twierdzenie

Każdą macierz $A \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$ można przedstawić w postaci iloczynu $A = U\Sigma V^T$, gdzie:

- $U \in M_{m\times m}(\mathbb{R})$ jest macierzą ortogonalną
- $\Sigma \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$ jest macierzą postaci $\begin{pmatrix} D & 0 \end{pmatrix}$ *lub* $\begin{pmatrix} D \\ 0 \end{pmatrix}$ dla $D$ diagonalnej z nieujemnymi wyrazami na przekątnej uporządkowanymi nierosnąco
- $V \in M_{n\times n}(\mathbb{R})$ jest macierzą ortogonalną.

# Spis treści

# Uproszczenie

Przeprowadzimy dowód dla założenia, że $m = n$ i wszystkie wartości własne macierzy $A^T A$ są dodatnie.

# Dowód cz. I

Macierz $A^T A$ jest symetryczna, więc możemy skorzystać z twierdzenia spektralnego i zapisać ją w postaci

$$A^T A = VDV^T$$

gdzie $D$ diagonalna

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

oraz $V$ ortogonalna.

# Dowód cz. II

Ponadto bez straty ogólności możemy założyć, że wartości na przekątnej macierzy $D$ są uporządkowane nierosnąco, czyli $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n > 0$.
Niech $U = AVD^{-\frac{1}{2}}$. Zauważmy, że

$$UD^{\frac{1}{2}}V^T = AVD^{-\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}V^T = AVIV^T = AI = A$$

Wystarczy teraz pokazać, że $U$ jest ortogonalna. Pokażemy, że $UU^T = U^TU = I$

# Dowód cz. III

$$UU^T = AVD^{-\frac{1}{2}}(AVD^{-\frac{1}{2}})^T = AVD^{-\frac{1}{2}}D^{-\frac{1}{2}}V^TA^T =$$

$$AVD^{-1}V^TA^T = A(A^TA)^{-1}A^T = AA^{-1}(A^T)^{-1}A^T = I$$

$$U^TU = (AVD^-\frac{1}{2})^TAVD^{-\frac{1}{2}} =$$

$$D^{-\frac{1}{2}}V^TA^TAVD^{-\frac{1}{2}} = D^{-\frac{1}{2}}DD^{-\frac{1}{2}} = I$$

Zatem $U$ jest ortogonalna.

# Uwaga konstrukcyjna

## Uwaga

Macierz $U$ jest macierzą wektorów własnych macierzy $AA^T$.

# Uwaga konstrukcyjna

## Uwaga

Macierz $U$ jest macierzą wektorów własnych macierzy $AA^T$.

## Dowód

Mamy

$$U = AVD^{-\frac{1}{2}} = A \begin{pmatrix} v_1 & \dots v_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} A v_1 & \dots & \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} A v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 & \dots & u_m \end{pmatrix}$$

czyli $u_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} A v_i$.

# Uwaga konstrukcyjna

Pokażemy, że $u_i$ jest wektorem własnym macierzy $AA^T$ dla wartości własnej $\lambda_i$.

$$AA^T \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} Av_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} AA^T Av_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} A\lambda_i v_i = \sqrt{\lambda_i} Av_i$$

$$AA^T \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} Av_i = \sqrt{\lambda_i} Av_i$$

# Dwa kroki

- Bidiagonalizacja macierzy
- Rozkład SVD macierzy bidiagonalnej

$$\begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & \ddots & \\ & & & \ddots & * \\ & & & & * \end{pmatrix}$$

# Transformacje Householdera

Do bidiagonalizacji będziemy wykorzystywać macierze transformacji Householdera. Wyraża się je wzorem

$$A = I - 2vv^t$$

gdzie $v$ jest wektorem długości 1. Wtedy macierz $A$ jest macierzą ortogonalną.

# Bidiagonalizacja

W pierwszym kroku mnożymy naszą macierz przez taką macierz $P_1$, że wyzerujemy wyrazy z pierwszej kolumny.

$$P_1 \cdot \begin{pmatrix} * & * & \dots & * \\ * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \dots & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix}$$

# Bidiagonalizacja

Następnie z prawej strony mnożymy przez macierz $Q_1$ taką, że wyzerujemy wyrazy z pierwszego wiersza.

$$\begin{pmatrix} * & * & * & \dots & * \\ 0 & * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \dots & * \end{pmatrix} \cdot Q_1 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & \dots & 0 \\ 0 & * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \dots & * \end{pmatrix}$$

## Bidiagonalizacja

Wyzerowanie odpowiednich elementów kolumn i wierszy w macierzy $A$ tworzy ciąg macierzy $Q_1, \ldots, Q_n$ i $P_1, \ldots, P_n$. Niech

$$P = P_n \ldots P_1$$

$$Q = Q_1 \ldots Q_n$$

wtedy $PAQ = J$, gdzie $J$ bidiagonalna.

# Metoda iteracyjna

$$S_n \dots S_1 \cdot J \cdot T_1 \dots T_n \xrightarrow{n \to \infty} \begin{pmatrix} * & & & \\ & * & & \\ & & \ddots & \\ & & & * \end{pmatrix}$$

- metoda iteracyjna – koszt pojedynczego kroku: $O(n^2)$
- metoda "bezpośrednia" – koszt całości: $O(n^3)$

# Macierze obrotu Givensa

$$G(i,j,\theta) = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & c & \dots & -s & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & s & \dots & c & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

gdzie $c = \cos(\theta)$ i $s = \sin(\theta)$

# Macierze obrotu Givensa

Dokładniej $G(i, j, \theta)$ jest macierzą identycznościową z wyjątkiem wyrazów

$$g_{i,i} = g_{j,j} = c$$

$$g_{i,j} = -g_{j,i} = s$$

Zauważmy, że ta macierz jest ortogonalna.

# Pojedyncza iteracja

Najpierw mnożymy z prawej strony przez macierz $T_2 = G(1, 2, \theta)$.

$$\begin{pmatrix} * & * & 0 & \dots & 0 \\ 0 & * & * & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & * \end{pmatrix} \cdot T_2 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & \dots & 0 \\ * & * & * & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & * \end{pmatrix}$$

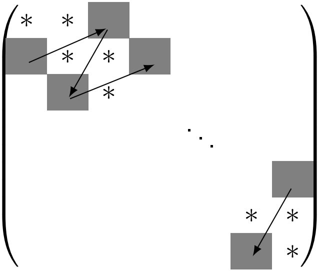
# Pojedyncza iteracja

Następnie dobieramy macierz obrotu Givensa $S_2$ tak, by po przemnożeniu z lewej strony wyzerować element $(2, 1)$.

$$S_2 \cdot \begin{pmatrix} * & * & 0 & \dots & 0 \\ \boxed{*} & * & * & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & \boxed{*} & \dots & 0 \\ 0 & * & * & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & * \end{pmatrix}$$

# Pojedyncza iteracja

Można to zobrazować następująco:



# Macierze ortogonalne

Mamy macierz diagonalną, ale jak odtworzyć macierze ortogonalne?

# Macierze ortogonalne

Mamy macierz diagonalną, ale jak odtworzyć macierze ortogonalne?
Należy je spamiętywać.

# Macierze ortogonalne

Mamy macierz diagonalną, ale jak odtworzyć macierze ortogonalne? Należy je spamiętywać. Mamy $J = PAQ$ i $\Sigma = SJT$, czyli $A = P^T J Q^T$ i $J = S^T \Sigma T^T$.

Zatem

$$A = P^T(S^T \Sigma T^T)Q^T = (P^T S^T)\Sigma(T^T Q^T)$$

Skoro iloczyn macierzy ortogonalnych jest macierzą ortogonalną, to
$U \leftarrow P^T S^T$
$V^T \leftarrow T^T Q^T$

# Spis treści

# Kompresja danych

Mamy $A = U\Sigma V^T$ (SVD). Załóżmy, że

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & 0 & \dots & 0 \\ & \ddots & & \vdots & & \vdots \\ & & \sigma_r & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

# Kompresja danych

Zapiszmy macierze $U$ i $V$ jako $U = \begin{pmatrix} u_1 & \dots & u_m \end{pmatrix}$ i $V = \begin{pmatrix} v_1 & \dots & v_n \end{pmatrix}$.

# Kompresja danych

Zapiszmy macierze $U$ i $V$ jako $U = \begin{pmatrix} u_1 & \dots & u_m \end{pmatrix}$ i $V = \begin{pmatrix} v_1 & \dots & v_n \end{pmatrix}$.
Wtedy

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} u_1 & \dots & u_m \end{pmatrix} \Sigma \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} =$$

$$= \sigma_1 u_1 v_1^T + \sigma_2 u_2 v_2^T + \ldots + \sigma_r u_r v_r^T$$

# Skracanie sumy

- wartości na przekątnej macierzy $\Sigma$ są uporządkowane nierosnąco
- wektory $u_i$ oraz $v_i$ są długości 1

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} u_1 & \dots & u_m \end{pmatrix} \Sigma \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} =$$

$$= \sigma_1 u_1 v_1^T + \ldots + \sigma_r u_r v_r^T \approx \sigma_1 u_1 v_1^T + \ldots + \sigma_l u_l v_l^T$$

dla $l \leq r$.

# Oszczędność pamięciowa

**WAŻNE**

Dane często są przechowywane w postaci bardzo dużych prostokątnych macierzy, więc przedstawienie ich w postaci zredukowanego rozkładu SVD może przynieść dużą oszczędność pamięciową.

# Spis treści

# Pseudoodwrotność

Pseudoodwrotność macierzy $A \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$ rozumiemy jako macierz $A^\dagger \in M_{n\times m}(\mathbb{R})$ taką, że

$$AA^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

# Pseudoodwrotność

SVD może zostać użyte do policzenia pseudoodwrotności macierzy. Niech $A = U\Sigma V^T$. Wtedy $A^\dagger = V\Sigma^\dagger U^T$, gdzie $\Sigma^\dagger$ rozumiemy jako

$$\Sigma^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & & 0 & \dots & 0 \\ & \ddots & & \vdots & & \vdots \\ & & \frac{1}{\sigma_r} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

# Rozwiązywanie równań jednorodnych

**Fakt**

$$(\forall x \in \mathbb{R}^n)(Ax = 0 \Leftrightarrow A^T Ax = 0)$$

Zatem wystarczy rozwiązać układ $A^T Ax = 0$. Po zdiagonalizowaniu macierzy symetrycznej (tw. spektralne) $A^T A = VDV^T$ możemy podać rozwiązanie jako przestrzeń rozpinaną przez kolumny $V$ odpowiadające zerowym wartościom własnym.

# Obraz, jądro i rząd

## Fakt

Dla macierzy $A = U\Sigma V^T$:

- kolumny macierzy $U$ odpowiadające niezerowym wartościom szczególnym rozpinają obraz przekształcenia liniowego zadanego macierzą $A$
- kolumny macierzy $V$ odpowiadające zerowym wartościom własnym $A^T A$ rozpinają jądro przekształcenia liniowego zadanego macierzą $A$
- $rank(A) = \#$ wartości szczególnych

# Źródła cz. I

G. H. Golub and C. Reinsch *Handbook Series Linear Algebra. Singular Value Decomposition and Least Squares Solutions.* Numer. Math. 14, 403–420 (1970)

G. Golub and W. Kahan, *Calculating the Singular Values and Pseudo-inverse of a Matrix.* J. Siam Numer. Anal., Ser. B, Vol. 2, No. 2. Printed in U.S.A.. 1965

*Singular value decomposition.* Wikipedia: The Free Encyklopedia (16.05.2020) https://en.wikipedia.org/wiki/Singular_value_decomposition

*Understanding Singular Value Decomposition and its Application in Data Science.* (16.05.2020) https://towardsdatascience.com/understanding-singular-value-decomposition-and-its-application-in-data-science-388a54be95d

# Źródła cz. II


*Singular Value Decomposition as Simply as Possible* (16.05.2020)
https://gregorygundersen.com/blog/2018/12/10/svd/

A. Kiełbasiński and Hubert Schwetlick, *Numeryczna algebra liniowa.* Wydawnictwo Naukowo-Techniczne

Åke Björck and Germund Dahlquist, *Numerical Methods in Scientific Computing. Volume II.*

*MATH2071: LAB #9: The Singular Value Decomposition.* (16.05.2020)
http://www.math.pitt.edu/ sussmanm/2071Spring08/lab09/index.html

*Wikiwand. Singular value decomposition.* (16.05.2020)
https://www.wikiwand.com/en/Singular_value_decomposition?fbclid=IwAR0_B1ohQBsQnXalAqx869TnLd2jWU2Mc2TQTwnkXkV_pMLyT3H189kIbz4#