Wissenschaftliches Rechnen - Großübung 3.2

Themen: Singulärwertzerlegung, Hauptkomponentenanalyse

Ugo & Gabriel

6. Dezember 2022

Aufgabe 1: Singulärwertzerlegung

1. Die Singulärwertzerlegung ist eine Faktorisierung einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ in $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^\mathsf{T}$. Im Folgenden betrachten wir ausschließlich die volle Form.
   a) Was steht in den Spalten von $\mathbf{U}$ und $\mathbf{V}$? Welche Eigenschaft haben diese Matrizen?
   b) Wie sieht $\mathbf{\Sigma}$ aus?
   c) Was für eine Art von Transformation beschreiben $\mathbf{U}, \mathbf{V}$ und $\mathbf{\Sigma}$?
   d) Welche Eigenschaft muss eine Matrix haben, damit sie wie oben beschrieben faktorisiert werden kann?

2. Für die folgende Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ werden vier Zerlegungen $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^\mathsf{T}$ vorgestellt. Entscheide, ob es sich bei diesen um eine korrekte SVD handelt oder nicht.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

   a) $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}, \ \mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \ \mathbf{V}^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
   b) $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \ \mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}, \ \mathbf{V}^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
   c) $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \ \mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \ \mathbf{V}^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
   d) $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \ \mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \ \mathbf{V}^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

3. Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ quadratisch und $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^\mathsf{T}$ eine Singulärwertzerlegung:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} | & & | \\ \mathbf{u}_1 & \dots & \mathbf{u}_n \\ | & & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sigma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} — & \mathbf{v}_1^\mathsf{T} & — \\ & \vdots & \\ — & \mathbf{v}_n^\mathsf{T} & — \end{bmatrix}$$

   Entscheide, ob die folgenden Aussagen im Allgemeinen gelten oder nicht.
   a) $\mathbf{A}\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$
   b) $\mathbf{A}\mathbf{u}_i = \sigma_i \mathbf{v}_i$
   c) $\mathbf{A}\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{v}_i$

d) Falls $\sigma_i > 0$ und $\sigma_{i+1} = \ldots = \sigma_n = 0$, dann ist $\mathbf{v}_{i+1}, \ldots, \mathbf{v}_n$ eine Basis des Kerns von $\mathbf{A}$

e) Falls $\sigma_i > 0$ und $\sigma_{i+1} = \ldots = \sigma_n = 0$, dann ist $\mathbf{u}_{i+1}, \ldots, \mathbf{u}_n$ eine Basis des Kerns von $\mathbf{A}^\mathsf{T}$

f) $\det \mathbf{A} = \prod_{i=1}^n \sigma_i$

g) Falls $\mathbf{A}$ symmetrisch ist, gilt $\mathbf{U} = \mathbf{V}$

h) Falls $\mathbf{A}$ orthogonal ist, gilt $\sigma_1 = \sigma_2 = \ldots = 1$

i) Falls $\mathbf{A}$ eine Diagonalmatrix ist, gilt $\mathbf{U} = \mathbf{V} = \mathbf{I}$

j) $\mathbf{A}^2 = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}^2\mathbf{V}^\mathsf{T}$

4. Wie kann man anhand der Singulärwerte den Rang einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ bestimmen?

5. Die SVD einer Matrix ist nicht eindeutig bestimmt. Gib eine Matrix und zwei unterschiedliche SVDs dazu an.

6. Gibt es Matrizen, welche unendlich viele SVDs haben? Falls ja, unter welchen Bedingungen?

7. Erinnerung: Die Kondition einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ist definiert als

$$\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\max_{\|\mathbf{x}\|=1} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\min_{\|\mathbf{x}\|=1} \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}.$$

Zeigen Sie, dass die Kondition von $\mathbf{A}$ bezüglich der ℓ^2-Norm berechnet werden kann durch $\kappa(\mathbf{A}) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$.

8. Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ eine Matrix und $\mathbf{A}^+$ ihre Pseudoinverse. Entscheide für die folgenden Aussagen, ob sie gelten oder im Allgemeinen falsch sind.

a) $\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{I}$

b) $\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{I}$

c) $\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A}$

d) $\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+$

9. Was ist die Pseudoinverse eines (Spalten-)Vektors $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$?

Aufgabe 2: Hauptkomponentenanalyse

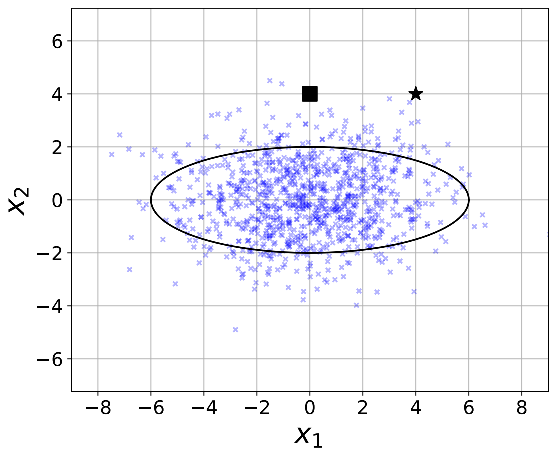
Ziel der Hauptkomponentenanalyse ist es für eine Menge an Datenpunkten $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^d$ eine reduzierte Basis mit $k \ll n$ Basisvektoren zu finden, sodass die Daten bezüglich dieser Basis möglichst exakt dargestellt werden können. Für einen Basisvektor (die sog. erste Hauptkomponente) lautet das Optimierungsproblem:

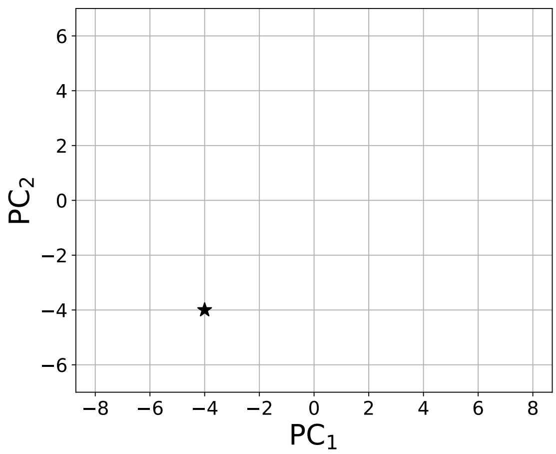
$$\min_{\mathbf{w}} \quad \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{x}_i - \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{w} \rangle \mathbf{w}\|^2 \quad \text{s.t.} \quad \|\mathbf{w}\| = 1$$

Dabei nehmen wir an, dass die Daten zentiert sind, d.h. $\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i = \mathbf{0}$.

1. Welche geometrische Bedeutung hat die Fehlerfunktion, die minimiert wird?
2. Das Optimierungsproblem lässt sich als Maximierungsproblem umschreiben. Wie lautet für dieses die Zielfunktion?
3. Welche Bedeutung hat die Zielfunktion des Maximierungsproblems?
4. Zeigen Sie, dass die Lösung des Problems ein Eigenvektor einer bestimmten Matrix ist. Welchen Zusammenhang zu Singulärvektoren hat die Lösung?
5. Die Lösung der obigen Optimierungsprobleme ist die erste Hauptkomponente. Wie erhält man die zweite Hauptkomponente? Welche Eigenschaft hat diese?
6. Welche Bedeutung hat ein Singulärwert σ_i bzw. ein Eigenwert $\lambda_i = \sigma_i^2$?
7. Sie führen eine Hauptkomponentenanalyse auf einem dreidimensionalen Datensatz durch und berechnen die Singulärwerte $\sigma_1 = 10$, $\sigma_2 = \sigma_3 = 0$. Falls Sie den Datensatz visualisieren: Was würden Sie feststellen?
8. Die folgende Geschichte ist garantiert so passiert: Ihr Freund führt eine Hauptkomponentenanalyse auf einer zweidimensionalen zentrierten Punktemenge durch. Leider hat er das Ergebnis verloren und weiß nur, dass er einen Punkt, der die Form eines Sterns hat, in den Raum der PCs projiziert hat. Nun wendet er sich an Sie und zeigt Ihnen seinen Datensatz mit der statistischen Verteilung sowie den Stern und dessen Projektion in den von den PCs aufgespannten linearen Unterraum. Helfen Sie Ihrem Freund beim Wiederherstellen seiner Ergebnisse!

   Hinweis: Sie sollen genau dieselben Hauptkomponenten berechnen, die Ihr Freund auch berechnet hat.





a) Zeichnen Sie die Hauptkomponenten, die Ihr Freund berechnet hat, in das linke Bild.
b) Wo landet das Quadrat, wenn man es in den Raum der Hauptkomponenten rein projiziert? Zeichnen Sie dessen Projektion in das rechte Bild.