CALCUL NUMERIC
Curs 1

Paul Irofti
Cristian Rusu
Andrei Pătraşcu

Departament Informatică
Universitatea din Bucureşti

- **Valori singulare**
- Descompunerea Valorilor Singulare
- Rotaţie subspaţii
- Calcul DVS

Teoremă

Fie matricea $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ cu rangul $r \in [0, \min(m, n)]$, atunci există matricile ortonormale $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ astfel încât:

$$U^T A V = \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

unde

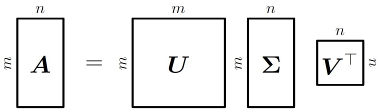
$$\Sigma_1 = \mathrm{diag}\left(\sigma_1, \cdots, \sigma_r\right),$$

cu

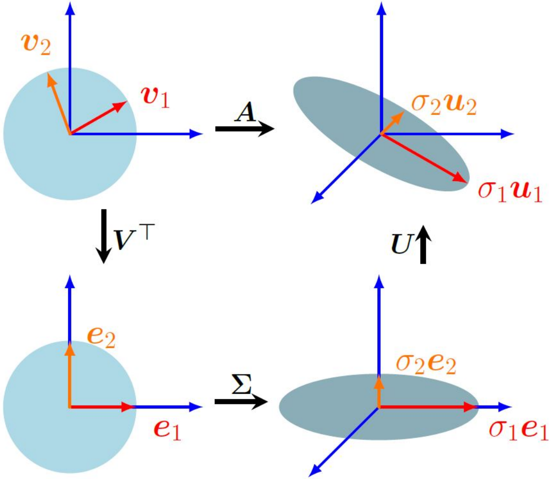
$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0.$$

Expresia $A = U \Sigma V^T$ se numeşte Descompunerea Valorilor Singulare a matricei A.

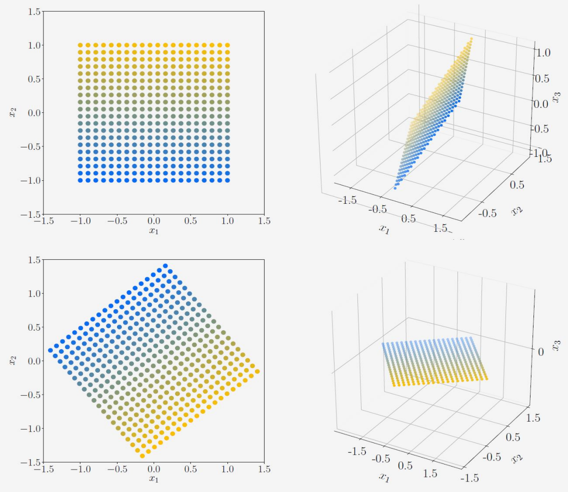
- σ_i se numesc valori singulare
- $U = \begin{bmatrix} u_1 & \cdots & u_m \end{bmatrix}$ se numesc vectori singulari la stânga
- $V = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{bmatrix}$ se numesc vectori singulari la dreapta



- Σ is unique and has the same form as A
- if $m < n$ then $\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \cdots & 0 & 0 \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 \cdots & 0 & 0 \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 \cdots & 0 \\ 0 & 0 \cdots & \sigma_m & 0 \cdots & 0 \end{bmatrix}$
- if $m > n$ then $\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \cdots & \sigma_m \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$


v_2
v_1
A
$\sigma_2 u_2$
$\sigma_1 u_1$
$V^\top$
U
e_2
e_1
Σ
$\sigma_2 e_2$
$\sigma_1 e_1$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -0.8 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -0.79 & 0 & -0.62 \\ 0.38 & -0.78 & -0.49 \\ -0.48 & -0.62 & -0.62 \end{bmatrix}}_{U} \underbrace{\begin{bmatrix} 1.62 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\Sigma} \underbrace{\begin{bmatrix} -0.78 & 0.62 \\ -0.62 & -0.78 \end{bmatrix}}_{V^T}$$



x_1
x_2
x_3
-1.5
-0.5
0.5
1.5

Fie $A = U\Sigma V^T$, atunci:

- $Av_i = \sigma_i u_i$ şi $A^T u_i = \sigma_i v_i$ pentru $i = 1 : n$
- $\sigma_{\max}$ = valoarea singulară maximă a matricii A
- $\sigma_{\min}$ = valoarea singulară minimă a matricii A
- $\sigma_{\min}\|x\|_2 \leq \|Ax\|_2 \leq \sigma_{\max}\|x\|_2$
- $A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^T$
- Teoreme baze subspaţii şi Eckart-Young

• Considerăm $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matricea de date obţinută dintr-un anume set de măsurători
• În general, dacă masurătorile sunt repetate atunci o a doua matrice $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ este obţinută

Problema Procrust Ortogonală: este posibil ca matricea B să fie obţinută prin rotaţia lui A?

$$\min_{Q} \ \|A - BQ\|_F$$
$$\text{s.l.} \ \ Q^T Q = I_n$$

Soluţia Q^* se calculează folosind descompunerea DVS!

$$
\begin{aligned}
\|A - BQ\|_F^2 &= \sum_{i=1}^{n} \|A_i - BQ_i\|_2^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} \|A_i\|_2^2 + \|BQ_i\|_2^2 - 2\langle A_i, BQ_i \rangle \\
&= \|A\|_2^2 + \|BQ\|_2^2 - 2\sum_{i=1}^{n} [A^T BQ]_{ii} \\
&= \|A\|_2^2 + \|B\|_2^2 - 2Tr(A^T BQ)
\end{aligned}
$$

Problema Procust originală se reduce la:

$$\max_{Q} \; Tr(QB^T A)$$
$$\text{s.l.} \; Q^T Q = I_n$$

DVS: $U^T(B^T A)V = \Sigma$
Notăm: $Z := VQU^T$

$$Tr(QB^T A) = Tr(QU^T \Sigma V) = Tr(VQU^T \Sigma)$$
$$= Tr(Z\Sigma) = \sum_{i=1}^{n} Z_{ii}\sigma_i \leq \sum_{i=1}^{n} \sigma_i$$

Soluţia presupune ajustarea $Z = I_n$, adică $Q = UV^T$

Rotaţia unui subspaţiu

Problema Procust originală se reduce la:

$$\begin{aligned} \max_{Q} \quad & Tr(QB^T A) \\ \text{s.l.} \quad & Q^T Q = I_n \end{aligned}$$

Algorithm 1: Procust

Data: $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$C = B^T A$

Calculează DVS: $U^T C V = \Sigma$

$Q = U V^T$

Pentru orice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, gramianul $A^T A \in \mathbb{R} n \times n$ este o matrice simetrică pozitiv semidefinită, i.e.

$$A^T A = P \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} P^T \qquad \text{unde } P^T P = I_n$$

Spectrul $\{\lambda_i\}_{1 \leq i \leq n}$ reprezintă valorile proprii ale matricii A.

Dacă presupunem disponibilă DVS a matricii A, atunci

$$A^T A = (U\Sigma V^T)^T(U\Sigma V^T) = V\Sigma \underbrace{U^T U}_{I_n} \Sigma V^T$$

$$= V \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix} V^T$$

Se identifică:

$$V^T = P^T$$

$$\sigma_i^2 = \lambda_i$$

Vectorii proprii ai lui $A^T A$ compun vectorii singulari la dreapta a lui A!

Aplicăm o procedură similară pentru vectorii singulari la stânga:

$$AA^T = (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U\Sigma \underbrace{V^T V}_{I_n} \Sigma U^T$$

$$= U \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_m^2 \end{bmatrix} U^T$$

Matricea AA^T este diagonalizabilă, deci este posibil calculul vectorilor proprii $AA^T = QSQ^T$

Se identifică:

$$U = Q$$

Vectorii proprii ai lui AA^T compun vectorii singulari la stânga ai lui A!

- Step 1: Formează $C = A^T A$
- Step 2: Aplică algoritmul QR simetric pentru calculul V astfel: $V^T C V = \text{diag}\left(\sigma_1^2, \cdots, \sigma_n^2\right)$
- Step 3: Calculează $u_i = \frac{1}{\sigma_i^2} A v_i$ pentru $i = 1 : n$
- Step 3': Calculează folosing fact. QR $AV = \underbrace{U}_{Q} \underbrace{\Sigma}_{R}$

- Step 1: Formează $C = A^T A$
- Step 2: Aplică algoritmul QR simetric pentru calculul V astfel: $V^T C V = \text{diag}\left(\sigma_1^2, \cdots, \sigma_n^2\right)$
- Step 3: Calculează $u_i = \frac{1}{\sigma_i^2} A v_i$ pentru $i = 1 : n$
- Step 3': Calculează folosing fact. QR $AV = \underbrace{U}_{Q} \underbrace{\Sigma}_{R}$

În practică formarea $A^T A$ sau AA^T este costisitoare!

- Step 1: Formează $C = A^T A$
- Step 2: Aplică algoritmul QR simetric pentru calculul V astfel: $V^T C V = \text{diag}\left(\sigma_1^2, \cdots, \sigma_n^2\right)$
- Step 3: Calculează $u_i = \frac{1}{\sigma_i^2} A v_i$ pentru $i = 1 : n$
- Step 3': Calculează folosing fact. QR $AV = \underbrace{U}_{Q} \underbrace{\Sigma}_{R}$

În practică formarea $A^T A$ sau AA^T este costisitoare! Exemplu î n carte!

Referinţe

- Van Loan, Charles F., and G. Golub. ”Matrix computations (Johns Hopkins studies in mathematical sciences).” (1996).