

CALCUL NUMERIC

Valori Singulare

Paul Irofti
Cristian Rusu
Andrei Pătrașcu

Departament Informatică
Universitatea din București

- **Valori singulare**
- Descompunerea Valorilor Singulare
- Rotație subspații
- 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

$$\Sigma_1 = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \quad \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0.$$

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

- σ_i se numesc valori singulare
- $U = [u_1 \ \dots \ u_m]$ se numesc vectori singulari la stânga
- $V = [v_1 \ \dots \ v_n]$ se numesc vectori singulari la dreapta

Nr. de valori singulare pozitive ale unei matrice este egal cu rangul acesteia

Exemplu: Fie matricea $A = \begin{bmatrix} 1 & -0.8 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ cu DVS:

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

$\sigma_1 = 1.62, \sigma_2 = 1$, deci A are rang 2 (echivalent, cele 2 coloane sunt liniar independente)



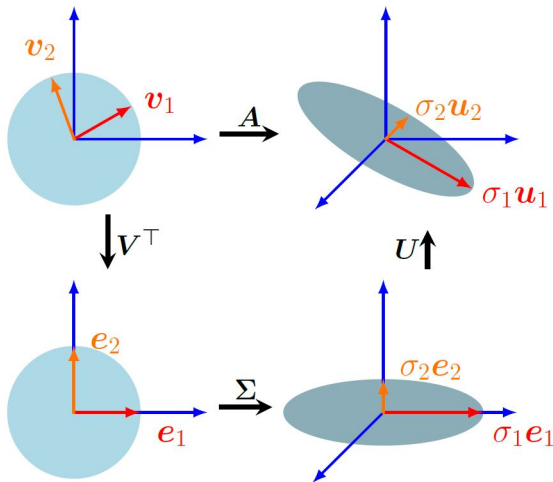
$$\begin{matrix} n \\ m \end{matrix} \begin{bmatrix} A \end{bmatrix} = \begin{matrix} m \\ m \end{matrix} \begin{bmatrix} U \end{bmatrix} \begin{matrix} n \\ m \end{matrix} \begin{bmatrix} \Sigma \end{bmatrix} \begin{matrix} n \\ n \end{matrix} \begin{bmatrix} V^T \end{bmatrix}$$

- 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 $\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \cdots & \sigma_m \\ 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$





Proprietăți ale DVS:

- $Av_i = \sigma_i u_i$ și $A^T u_i = \sigma_i v_i$ pentru $i = 1 : n$
- $\sigma_{\min} \|x\|_2 \leq \|Ax\|_2 \leq \sigma_{\max} \|x\|_2$
- Forma redusă: $A = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T = U \Sigma V^T$



Problema Procrust Ortogonală: Fie matricile $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$, este posibil ca matricea A să fie obținută prin rotația lui B ?

$$\begin{aligned} \min_Q \quad & \|A - BQ\|_F \\ \text{s.l.} \quad & Q^T Q = I_n \end{aligned}$$

- Se caută matricea ortogonală optimă Q^* care minimizează distanța de la A la transformarea BQ^*
- Soluția Q^* se calculează folosind descompunerea DVS!



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

Primii doi termeni $\|A\|_2^2$ și $\|B\|_2^2$ sunt constante în raport cu Q



Problema Procust originală se reduce la:

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

$$\text{DVS: } U^T(B^T A)V = \Sigma$$

$$\text{Notăm: } Z := VQU^T$$

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

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



Problema Procust originală se reduce la:

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

Algorithm 1: Procust

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

- 1 $C = B^T A$
 - 2 Calculează DVS: $U^T C V = \Sigma$
 - 3 $Q = UV^T$
-



Se observă ușor din relațiile specifice vectorilor singulari:

$$\begin{cases} Av_i = \sigma_i u_i \\ A^T u_i = \sigma_i v_i \end{cases}$$

prin înmulțirea de ambele părți cu A^T (respectiv, a doua relație, cu A) se obține

$$\begin{cases} A^T A v_i = \sigma_i^2 v_i \\ A A^T u_i = \sigma_i^2 u_i \end{cases}$$

ce arată că v_i sunt vectori proprii ai gramianului $A^T A$, iar u_i ai lui $A A^T$.



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.

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

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



Dacă presupunem disponibilă DVS a matricii A , atunci

$$\begin{aligned} A^T A &= (U \Sigma V^T)^T (U \Sigma V^T) = V \Sigma \underbrace{U^T U}_{I_n} \Sigma V^T \\ &= V \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n^2 \end{bmatrix} V^T \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} AA^T &= (U\Sigma V^T)(U\Sigma V^T)^T = U\Sigma \underbrace{V^T V}_{I_n} \Sigma U^T \\ &= U \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_m^2 \end{bmatrix} U^T \end{aligned}$$

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:
 $V^T C V = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2)$
- Step 3: Calculează $u_i = \frac{1}{\sigma_i} A v_i$ pentru $i = 1 : n$
- Step 3': Calculează folosind 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:
 $V^T C V = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2)$
- Step 3: Calculează $u_i = \frac{1}{\sigma_i^2} A v_i$ pentru $i = 1 : n$
- Step 3': Calculează folosind 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:
 $V^T C V = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2)$
- Step 3: Calculează $u_i = \frac{1}{\sigma_i^2} A v_i$ pentru $i = 1 : n$
- Step 3': Calculează folosind fact. QR $AV = \underbrace{U}_Q \underbrace{\Sigma}_R$

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



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

