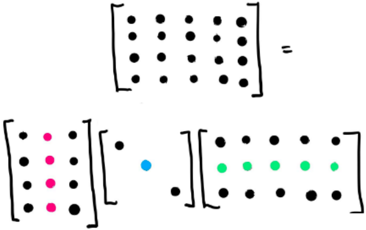
Сингулярное разложение

Виктор Китов

victorkitov.github.io



Курс поддержан фондом 'Интеллект'

Победитель конкурса VK среди курсов по IT

Содержание

1. Определение сингулярного разложения
2. Сокращенное сингулярное разложение
3. Применения сингулярного разложения
4. Простейшая рекомендательная система

Сингулярное разложение

Сингулярное разложение (singular value decomposition, SVD):

Каждая матрица $X \in \mathbb{R}^{NxD}$, rank $X = R$, может быть разложена:

$$X = U\Sigma V^T$$

где

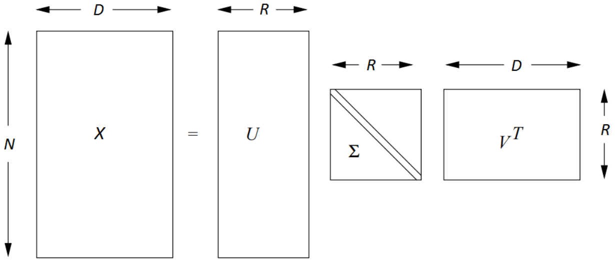
- $U \in \mathbb{R}^{NxR}$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{RxR}$, $V^T \in \mathbb{R}^{RxD}$
- $\Sigma = diag\{\sigma_1, \sigma_2, ...\sigma_R\}$, $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_R \geq 0$
- $U^T U = I$, $V^T V = I$, $I \in \mathbb{R}^{RxR}$ - единичная матрица.

Эквивалентно:

$$X = \sum_{i=1}^{R} \mathrm{u}_i \sigma_i \mathrm{v}_i^T$$

где u_i - i-ая колонка U and v_i^T - i-ая строка V^T.

Интерпретация сингулярного разложения



- Столбцы U - ортонормированный базис столбцов X
- Строки V^T- ортонормированный базис строк X
- Σ - важности базисных векторов.

SVD дает компактное представление низкоранговой матрицы.

Столбцы V=главные компоненты X

$$X^T X = \left(U\Sigma V^T\right)^T U\Sigma V^T = (V\Sigma U^T)U\Sigma V^T = V\Sigma^2 V^T$$

Домножая на V, получим[1]

$$X^T X V = V\Sigma^2 V^T V = V\Sigma^2 \quad (1)$$

- V состоит из СВ $X^T X$, отвечающих СЗ $\sigma_1^2, \sigma_2^2, ...\sigma_R^2$ **- это R главных компонент.**
- U - коэффициенты разложения объектов-строк X по главным компонентам.

[1] Сингулярные значения X - корень из СЗ $X^T X$, равные $\sigma_1, ...\sigma_R$.

Нахождение U

$$XX^T = U\Sigma V^T \left(U\Sigma V^T\right)^T = U\Sigma V^T V\Sigma U^T = U\Sigma^2 U^T$$

Домножая справа на U, получим

$$XX^T U = U\Sigma^2 U^T U = U\Sigma^2.$$

U состоит из СВ XX^T, отвечающих СЗ $\sigma_1^2, \sigma_2^2, ...\sigma_R^2$.

SVD: существование & единственность

Теорема 1

Для $\forall X \in \mathbb{R}^{NxD}$ *сингулярное разложение существует.*

Теорема 2

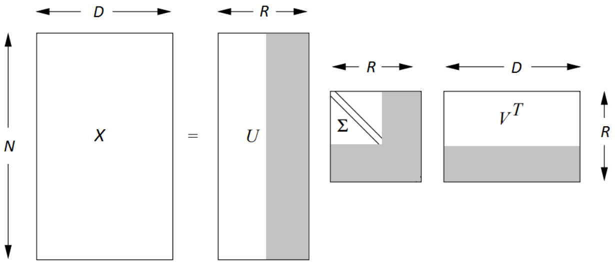
Сингулярное разложение единственно с точностью до знака <=> $X^T X \in \mathbb{R}^{DxD}$ *содержит* D *уникальных СВ.*

С точностью до знака означает, что мы всегда можем одновременно поменять знаки u_i и v_i^T для $\forall i = 1, 2, ...R$.

Содержание

1. Определение сингулярного разложения
2. Сокращенное сингулярное разложение
3. Применения сингулярного разложения
4. Простейшая рекомендательная система

Сокращенное сингулярное разложение



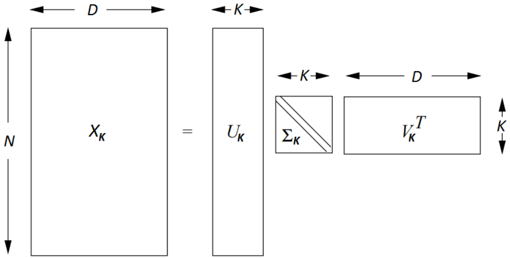
Сокращенное сингулярное разложение порядка K (truncated SVD): убрать наименее важные столбцы U и строки V^T.

- Важность измеряется $\sigma_1, \sigma_2, ...\sigma_R$.

$$\mathrm{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, ...\sigma_K, \sigma_{K+1}, ...\sigma_R\} \longrightarrow \mathrm{diag}\{\sigma_1, \sigma_2, ...\sigma_K, 0, 0, ..0\}$$

$$X = \sum_{i=1}^{R} \mathrm{u}_i \sigma_i \mathrm{v}_i^T \approx \sum_{i=1}^{K} \mathrm{u}_i \sigma_i \mathrm{v}_i^T$$

Сокращенное сингулярное разложение



Упрощение до ранга $K \le R$:

$$X_K = U_K \Sigma_K V_K \approx X$$

$$\Sigma = diag\{\sigma_1, \sigma_2, ...\sigma_K, \sigma_{K+1}, ...\sigma_R\} \longrightarrow diag\{\sigma_1, \sigma_2, ...\sigma_K\} = \Sigma_K$$
$$U = [u_1, u_2, ...u_K, u_{K+1}, ...u_R] \longrightarrow [u_1, u_2, ...u_K] = U_K$$
$$V = [v_1, v_2, ...v_K, v_{K+1}, ...v_R] \longrightarrow [v_1, v_2, ...v_K] = V_K$$

Свойства сокращенного сингулярного разложения

Норма Фробениуса для матриц

$$\|X\|_F^2 = \sum_{n=1}^{N} \sum_{d=1}^{D} x_{nd}^2$$

- Для матрицы X и её аппроксимации $\widehat{X}$ можем измерить

$$\text{ошибка аппроксимации} = \left\| \widehat{X} - X \right\|_F^2$$

Теорема 3

Пусть $X \in \mathbb{R}^{NxD}$ *аппроксимируется* $\widehat{X}_K = U_K \Sigma_K V_K$. *Тогда:*

1. $\operatorname{rank} X_K = K$.
2. $X_K = \arg\min_{B:\operatorname{rank} B \le K} \|X - B\|_F^2$

Выбор порядка аппроксимации K

Теорема 4

Для $\forall$*матрицы* X *и её разложения* $X = U\Sigma V^T$, $\Sigma = diag\{\sigma_1, ...\sigma_R\}$*:*

$$\|X\|_F^2 = \sum_{i=1}^{R} \sigma_i^2$$

- Пусть $X = U\Sigma V^T$, $\Sigma = diag\{\sigma_1, ...\sigma_R\}$
- Аппроксимация $\widehat{X}_K = U\Sigma_K V^T$, $\Sigma_K = diag\{\sigma_1, ...\sigma_K, 0, 0, ...0\}$.
- Ошибка аппроксимации $X - \widehat{X}_K = U\tilde{\Sigma}V^T$, где $\tilde{\Sigma} = diag\{0, 0, ...\sigma_{K+1}, ...\sigma_R\}$, поэтому

$$\left\|X - \widehat{X}_K\right\|_F^2 = \sum_{i=K+1}^{R} \sigma_i^2$$

Выбор порядка аппроксимации K

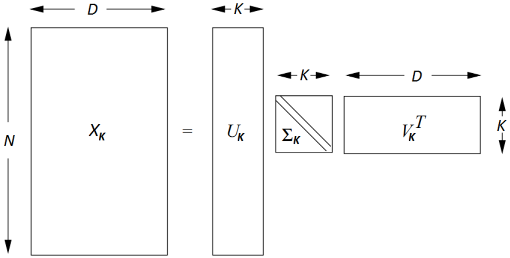
Используя теорему 4, выберем K, дающую относительную ошибку меньше порога:

$$K = \arg\min_K \left\{ \frac{\left\| X - \widehat{X}_K \right\|_F^2}{\|X\|_F^2} = \frac{\sum_{i=K+1}^R \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^R \sigma_i^2} < threshold \right\}$$

Содержание

1. Определение сингулярного разложения
2. Сокращенное сингулярное разложение
3. Применения сингулярного разложения
4. Простейшая рекомендательная система

Снижение размерности



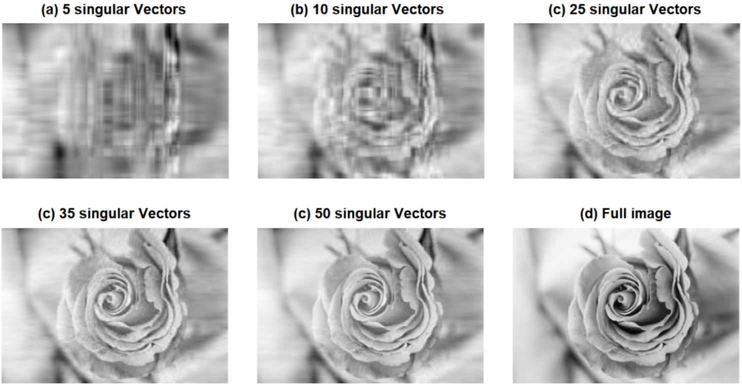
- строки U дают компактное представление объектов X.
- $x_n \in \mathbb{R}^D \longrightarrow u_n \in \mathbb{R}^K, \quad K \leq D.$

Экономия памяти

Рассчитайте стоимость хранения $X \in \mathbb{R}^{NxD}$, предполагая $N \geq D$:

представление X	требования по памяти
исходная X	?
полностью сингулярно разложенная X	?
сокращенно синг. разложенная ранга K	?

Пример: сжатие чёрно-белых изображений[2]



[2] Первоисточник.

Пример: сжатие цветных изображений[3]

[3] Сжатие - независимо по R,G,B каналам.

Вычислительные затраты

- Умножение Xq
    - X - нормализованное представление документов
    - q - нормализованный поисковый запрос

представление X	сложность Xq
исходная X	?
полностью сингулярно разложенная X	?
сокращенно синг. разложенная ранга K	?

Нахождение похожих объектов и похожих признаков

- Похожие объекты имеют похожие признаки.
- Похожие признаки совстречаются в объектах.
- Пример: обработка текстов.
    - сингулярное разложение дает высокоуровневое семантическое представление документов
    - можем сравнивать документы на семантическом уровне
        - синонимы объединяются
    - можем сравнивать слова

Содержание

1. Определение сингулярного разложения
2. Сокращенное сингулярное разложение
3. Применения сингулярного разложения
4. Простейшая рекомендательная система

Построение рекомендаций фильмов

	Терминатор	Гладиатор	Рэмбо	Титаник	История любви	Спеши любить
Андрей	4	5	5	0	0	0
Иван	4	4	5	0	0	0
Сергей	5	5	4	0	0	0
Анна	0	0	0	5	5	5
Мария	0	0	0	5	5	4
Наталья	0	0	0	4	5	4

Сингулярное разложение

$$U=\begin{pmatrix} 0. & 0.6 & -0.3 & 0. & 0. & -0.8 \\ 0. & 0.5 & -0.5 & 0. & 0. & 0.6 \\ 0. & 0.6 & 0.8 & 0. & 0. & 0.2 \\ 0.6 & 0. & 0. & -0.8 & -0.2 & 0. \\ 0.6 & 0. & 0. & 0.2 & 0.8 & 0. \\ 0.5 & 0. & 0. & 0.6 & -0.6 & 0. \end{pmatrix}$$

$$\Sigma=\text{diag}\{\begin{pmatrix} 14. & 13.7 & 1.2 & 0.6 & 0.6 & 0.5 \end{pmatrix}\}$$

$$V^T=\begin{pmatrix} 0. & 0. & 0. & 0.6 & 0.6 & 0.5 \\ 0.5 & 0.6 & 0.6 & 0. & 0. & 0. \\ 0.5 & 0.3 & -0.8 & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & -0.2 & 0.8 & -0.6 \\ -0. & -0. & -0. & 0.8 & -0.2 & -0.6 \\ 0.6 & -0.8 & 0.2 & 0. & 0. & 0. \end{pmatrix}$$

Сокращенное сингулярное разложение (K=2)

$$U_2 = \begin{pmatrix} 0. & 0.6 \\ 0. & 0.5 \\ 0. & 0.6 \\ 0.6 & 0. \\ 0.6 & 0. \\ 0.5 & 0. \end{pmatrix}$$

$$\Sigma_2 = \mathrm{diag}\{\begin{pmatrix} 14. & 13.7 \end{pmatrix}\}$$

$$V_2^T = \begin{pmatrix} 0. & 0. & 0. & 0.6 & 0.6 & 0.5 \\ 0.5 & 0.6 & 0.6 & 0. & 0. & 0. \end{pmatrix}$$

Перешли в на семантический уровень "тем"

- темы среди фильмов - боевик / мелодрама
- темы среди людей - мужчины / женщины

Построение рекомендаций

- Требуется построить рекомендации фильмов для нового человека:

$$x = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

1. Отображаем x в пространство тем фильмов y (снижение размерности):

$$y = V_2^T x = \begin{pmatrix} 0 & 2.7 \end{pmatrix}$$

2. Построение рекомендаций: отображаем y в исходное пространство всех оценок:

$$\widehat{x} = yV_2^T = \begin{pmatrix} 1.5 & 1.6 & 1.6 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Заключение

- Сингулярное разложение $X = U\Sigma V^T$, $U^T U = I$, $V^T V = I$, $\Sigma = \text{diag}\{\sigma_1, ...\sigma_R\}$ существует $\forall X$.
- Сокращенное сингулярное разложение порядка K
    - решает задачу:$X_K = \arg\min_{B:\text{rank}\, B \le K} \|X - B\|_F^2$
    - извлекает тематическую структуру объектов и признаков
        - разложение по темам=главным компонентам: снижение размерности
    - сокращает
        - расходы по памяти
        - расходы на вычисления
    - позволяет построить простую рекомендательную систему
    - недостаток: отсутствие оценки=0 трактуется как оценка.