

SVD rozklad a pseudoinverse

Odpřednesenou látku naleznete v kapitole 14 skript
Abstraktní a konkrétní lineární algebra.

Cíle této přednášky

- 1 Každá **symetrická** matice $\mathbf{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ má **pouze reálné vlastní hodnoty a je diagonalisovatelná.**^a

Navíc: vlastní vektory symetrické matice tvoří „hezkou bázi“ prostoru \mathbb{R}^n .

- 2 Jako důsledek předchozího ukážeme, že **každou** matici $\mathbf{M} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$ lze napsat jako^b

$$\mathbf{M} = \underbrace{\mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^T}_{\text{SVD rozklad } \mathbf{M}}$$

kde \mathbf{S} je „diagonální“ a $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T$ a $\mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^T$.

- 3 Ukážeme aplikace SVD rozkladu.

^aTento výsledek **nebudeme dokazovat**, vyžaduje hlubší znalosti z reálné analýzy.

^bVýpočty z této přednášky jsou časově velmi náročné. U ústní zkoušky může být vyžadováno základní pochopení teorie (str 7 a 8 tohoto tématu), nikoli výpočty.



Věta o hlavních osách (pro standardní skalární součin)

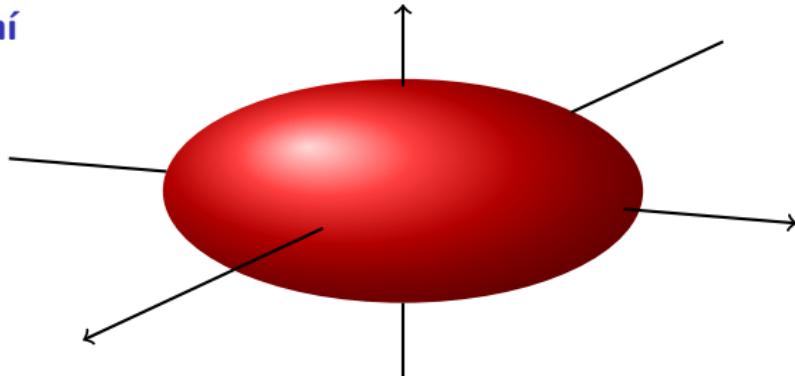
Pro každou **symetrickou** reálnou matici $\mathbf{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ existuje **ortonormální** báze \mathbb{R}^n složená z vlastních vektorů matice \mathbf{A} . Navíc matice \mathbf{A} má pouze **reálné** vlastní hodnoty.

Důkaz.

Bez důkazu (je těžký). Viz Důsledek 14.1.5 **skript**.



Vysvětlení



\mathbf{A} zobrazuje jednotkovou kouli na (případně degenerovaný) elipsoid.

Důsledek — SVD rozklad matice pro stand. skalární součin

Libovolnou matici $\mathbf{M} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$ lze zapsat ve tvaru \mathbf{USV}^T , kde

- ① $\mathbf{V} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^s$ a $\mathbf{U} : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}^r$ jsou **ortogonální**, tj. $\mathbf{V}^T = \mathbf{V}^{-1}$ a $\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1}$.
- ② $\mathbf{S} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$ má na hlavní diagonále kladná čísla $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_h$ (tzv. **singulární hodnoty** matice \mathbf{M}), kde $h = \text{rank}(\mathbf{M})$. Všude jinde má matice \mathbf{S} nuly.

Myšlenka důkazu

- ① Matice $\mathbf{A} = \mathbf{M}^T \mathbf{M} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^s$ je symetrická. Její vlastní hodnoty jsou **nezáporné**. Seřaďte je: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_s \geq 0$. Označte příslušnou **ortonormální** bázi jako $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_s)$.
- ② Definujte $\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1}, \dots, \sigma_s = \sqrt{\lambda_s}$. Vyberte **nenulová** σ_i : $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_h > 0$ a definujte $\mathbf{u}_i = \mathbf{M}\mathbf{v}_i/\sigma_i$ pro $i = 1, \dots, h$ a doplňte na **ortonormální** bázi $(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r)$.

Příklad (SVD rozklad)

Nalezneme SVD rozklad pro $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix}$.

$$\textcircled{1} \quad \mathbf{M}^T \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 14 & -2 \\ 4 & 8 \\ 11 & 7 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 200 & 40 & 140 \\ 40 & 80 & 100 \\ 140 & 100 & 170 \end{pmatrix}$$

\textcircled{2} Vlastní hodnoty $\mathbf{M}^T \mathbf{M}$ jsou $\lambda_1 = 360$, $\lambda_2 = 90$, $\lambda_3 = 0$.

Příslušná **ortonormální báze** vlastních vektorů je

$$\left(\begin{pmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2/3 \\ 2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/3 \\ -2/3 \\ 2/3 \end{pmatrix} \right). \text{ Tudíž } \mathbf{V} = \begin{pmatrix} 2/3 & -2/3 & -1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix}.$$

\textcircled{3} **Singulární hodnoty** \mathbf{M} jsou $\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = 6\sqrt{10}$,

$\sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = 3\sqrt{10}$. (Připomenutí: $\sigma_3 = \sqrt{\lambda_3} = \sqrt{0}$ není singulární hodnota.)

Příklad (SVD rozklad, pokrač.)

④ $\mathbf{u}_1 = \mathbf{M}\mathbf{v}_1/\sigma_1$ a $\mathbf{u}_2 = \mathbf{M}\mathbf{v}_2/\sigma_2$:

$$\frac{1}{6\sqrt{10}} \cdot \begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2/3 \\ 1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{3\sqrt{10}} \cdot \begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -2/3 \\ 2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{10} \\ 3/\sqrt{10} \end{pmatrix}$$

⑤ Plný SVD rozklad \mathbf{M} je:

$$\begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 6\sqrt{10} & 0 & 0 \\ 0 & 3\sqrt{10} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2/3 & -2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix}^T$$

Geometrie SVD rozkladu $\mathbf{M} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$ („pasivní“ pohled)

Matice $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_s)$ a $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r)$ jsou tvořeny vektory nových ortonormálních bází B a C prostorů \mathbb{R}^s a \mathbb{R}^r , ve kterých se $\mathbf{M} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$ jeví jako změna měřítka $\mathbf{S} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$.

$$\mathbb{R}^s \xrightarrow{\mathbf{T}_{K_s \mapsto B}} \mathbb{R}^s \xrightarrow{\mathbf{S}} \mathbb{R}^r \xrightarrow{\mathbf{T}_{C \mapsto K_r}} \mathbb{R}^r$$

Protože $\mathbf{T}_{K_s \mapsto B} = (\mathbf{T}_{B \mapsto K_s})^{-1} = \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^T$ a $\mathbf{T}_{C \mapsto K_r} = \mathbf{U}$, je vrchní obrázek přesně diagram

$$\mathbb{R}^s \xrightarrow{\mathbf{V}^T} \mathbb{R}^s \xrightarrow{\mathbf{S}} \mathbb{R}^r \xrightarrow{\mathbf{U}} \mathbb{R}^r$$

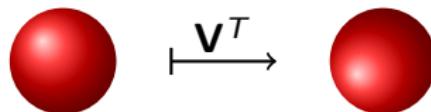
A to je přesně SVD rozklad matice \mathbf{M} .

Jde o „pasivní“ pohled: mění se souřadnicové systémy.

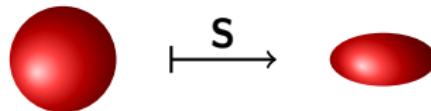
Geometrie SVD rozkladu $M = USV^T$ („aktivní“ pohled)

Obraz jednotkové koule v \mathbb{R}^s při zobrazení $x \mapsto Mx$:

- ① Rotace (případně nevlastní) $V^T : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^s$:



- ② Změna měřítka (případně i s degenerací) $S : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$:



- ③ Rotace (případně nevlastní) $U : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}^r$:



Jde o „aktivní“ pohled: objekty rotují.



Redukce SVD rozkladu a approximace SVD rozkladem

Plný SVD rozklad \mathbf{USV}^T matice \mathbf{M} hodnosti h lze psát jako

$$\mathbf{M} = \sum_{j=1}^h \sigma_j \cdot \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{v}_j^T$$

kde \mathbf{u}_j jsou sloupce \mathbf{U} a \mathbf{v}_j jsou sloupce \mathbf{V} .

Částečné součty

$$\mathbf{M}_k = \sum_{j=1}^k \sigma_j \cdot \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{v}_j^T$$

pro $k \leq h$ mají hodnost k a platí

$$\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_k\|_F = \min \{\|\mathbf{M} - \mathbf{X}\|_F \mid \mathbf{X} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r, \text{ rank}(\mathbf{X}) \leq k\}$$

kde

$$\|\mathbf{X}\|_F = \sqrt{\sum_{j=1}^s \mathbf{x}_j^T \cdot \mathbf{x}_j} = \sqrt{\sum_{j=1}^s \sum_{i=1}^r x_{ij}^2}$$

je **Frobeniova norma** matice $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s) = (x_{ij})$.

Příklad

Pro $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix}$ lze psát její SVD rozklad

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 6\sqrt{10} & 0 & 0 \\ 0 & 3\sqrt{10} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2/3 & -2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix}^T$$

jako

$$\mathbf{M} = 6\sqrt{10} \cdot \begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} \end{pmatrix} \cdot (2/3 \quad 1/3 \quad 2/3) + 3\sqrt{10} \cdot \begin{pmatrix} -1/\sqrt{10} \\ 3/\sqrt{10} \end{pmatrix} \cdot (-2/3 \quad 2/3 \quad 1/3)$$

a

$$\mathbf{M}_1 = 6\sqrt{10} \cdot \begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} \end{pmatrix} \cdot (2/3 \quad 1/3 \quad 2/3) = \begin{pmatrix} 18/15 & 9/15 & 18/15 \\ 6/15 & 3/15 & 6/15 \end{pmatrix}$$

Platí

$$\frac{\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_1\|_F}{\|\mathbf{M}\|_F} = \frac{3\sqrt{10}}{\sqrt{450}} \approx 0.477$$

Chyba při nahrazení částečným součtem SVD rozkladu

Platí rovnost:

$$\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_k\|_F = \sqrt{\sigma_{k+1}^2 + \dots + \sigma_h^2}$$

Speciálně:

$$\|\mathbf{M}\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \dots + \sigma_h^2}$$

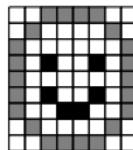
Podílu

$$\frac{\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_k\|_F}{\|\mathbf{M}\|_F} = \sqrt{\frac{\sigma_{k+1}^2 + \dots + \sigma_h^2}{\sigma_1^2 + \dots + \sigma_h^2}}$$

říkáme **relativní změna matice \mathbf{M}** (při nahrazení \mathbf{M} k -tým částečným součtem jejího SVD rozkladu).

SVD rozklad matic lze použít ke komprezii dat

Obrázek



lze zadat maticí

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0.5 & 0.5 & 0.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0.5 \\ 0.5 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0.5 \\ 0 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0.5 & 0.5 & 0.5 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

kde 0 = bílá, 0.5 = šedá, 1 = černá.

SVD rozklad matice lze použít ke komprezii dat (pokrač.)

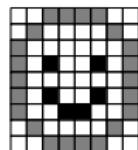
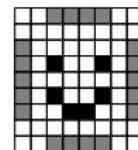
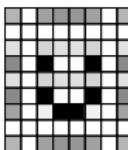
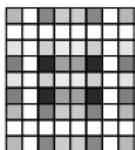
SVD rozklad matice \mathbf{M} má tvar \mathbf{USV}^T , kde matice \mathbf{S} je:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 2.57 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1.61 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.13 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.00 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ke komprezii stačí použijeme **singulární hodnoty** matice \mathbf{M} (první čtyři prvky na hlavní diagonále \mathbf{S}). Hodnoty σ_5 až σ_8 jsou rovny nule.

SVD rozklad matice lze použít ke komprezii dat (pokrač.)

Obrázky pro první čtyři aproximace matice \mathbf{M} vypadají takto:



Relativní změny matice \mathbf{M} jsou následující:

$$\frac{\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_1\|_F}{\|\mathbf{M}\|_F} \approx \sqrt{\frac{1.61^2 + 1.13^2 + 1.00^2}{2.57^2 + 1.61^2 + 1.13^2 + 1.00^2}} \approx 0.65$$

$$\frac{\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_2\|_F}{\|\mathbf{M}\|_F} \approx \sqrt{\frac{1.13^2 + 1.00^2}{2.57^2 + 1.61^2 + 1.13^2 + 1.00^2}} \approx 0.45$$

$$\frac{\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_3\|_F}{\|\mathbf{M}\|_F} \approx \sqrt{\frac{1.00^2}{2.57^2 + 1.61^2 + 1.13^2 + 1.00^2}} \approx 0.30$$

$$\frac{\|\mathbf{M} - \mathbf{M}_4\|_F}{\|\mathbf{M}\|_F} \approx \sqrt{\frac{0}{2.57^2 + 1.61^2 + 1.13^2 + 1.00^2}} = 0.00$$

Tvrzení

At $\mathbf{M} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$ je matici. Potom existuje nanejvýš jedna matici $\mathbf{M}^+ : \mathbb{R}^r \rightarrow \mathbb{R}^s$, která splňuje následující čtyři podmínky^a

$$\begin{array}{lcl} \mathbf{MM}^+\mathbf{M} & = & \mathbf{M} \\ \mathbf{M}^+\mathbf{MM}^+ & = & \mathbf{M}^+ \end{array} \quad \begin{array}{lcl} (\mathbf{M}^+\mathbf{M})^T & = & \mathbf{M}^+\mathbf{M} \\ (\mathbf{MM}^+)^T & = & \mathbf{MM}^+ \end{array}$$

^aMatici \mathbf{M}^+ , která tyto čtyři podmínky splňuje, říkáme **pseudoinverse** matici \mathbf{M} .

Důkaz.

Bez důkazu (není těžký, ale není zajímavý). Pro zájemce, viz Tvrzení 14.4.1 **skript**. 

Příklady pseudoinversí

- ① At' $\mathbf{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ je regulární matici. Potom $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$.
- ② At' $\mathbf{O}_{s,r} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$. Potom $(\mathbf{O}_{s,r})^+ = \mathbf{O}_{r,s}$.
- ③ At' $\mathbf{A} : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$ má hodnost k . Potom $\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$.

Pozorování: v tomto případě platí

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{b} = \text{proj}_{\text{im}(\mathbf{A})}(\mathbf{b})$$

Tudíž: $\mathbf{A}^+\mathbf{b}$ je řešení soustavy $(\mathbf{A} \mid \mathbf{b})$ metodou nejmenších čtverců (pro $\mathbf{G} = \mathbf{E}_n$).

- ④ At' $\mathbf{A} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^k$ má hodnost k . Potom $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^{-1}$.

V každém z případů stačí ověřit čtyři rovnosti

$$\mathbf{M}\mathbf{M}^+\mathbf{M} = \mathbf{M}, \quad \mathbf{M}^+\mathbf{M}\mathbf{M}^+ = \mathbf{M}^+, \quad (\mathbf{M}^+\mathbf{M})^T = \mathbf{M}^+\mathbf{M}, \\ (\mathbf{M}\mathbf{M}^+)^T = \mathbf{M}\mathbf{M}^+.$$

Věta (nalezení pseudoinverse pomocí SVD rozkladu)

Ať $\mathbf{M} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^T$ je plný SVD rozklad matice $\mathbf{M} : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}^r$, ať $\sigma_1, \dots, \sigma_h$ jsou singulární hodnoty matice \mathbf{M} . Potom platí:

① Matice

$$\mathbf{S}^+ = \left(\frac{1}{\sigma_1} \mathbf{e}_1, \dots, \frac{1}{\sigma_h} \mathbf{e}_h, \underbrace{\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}}_{(r-h)\text{-krát}} \right)$$

je pseudoinverse matice \mathbf{S} .

② Matice

$$\mathbf{M}^+ = \mathbf{V}\mathbf{S}^+\mathbf{U}^T$$

je pseudoinverse matice \mathbf{M} .

Důkaz.

Bez důkazu. Viz Důsledek 14.4.5 skript.



Příklad (výpočet pseudoinverse pomocí SVD rozkladu)

Nalezneme \mathbf{M}^+ pro matici

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 14 & 4 & 11 \\ -2 & 8 & 7 \end{pmatrix}$$

Plný SVD rozklad matice \mathbf{M} je roven

$$\begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 6\sqrt{10} & 0 & 0 \\ 0 & 3\sqrt{10} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2/3 & -2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix}^T$$

a proto

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^+ &= \begin{pmatrix} 2/3 & -2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1/(6\sqrt{10}) & 0 \\ 0 & 1/(3\sqrt{10}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \\ 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \end{pmatrix}^T \\ &= \frac{1}{180} \cdot \begin{pmatrix} 10 & -10 \\ 7 & 13 \\ 4 & 8 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Další aplikace SVD rozkladu — nepovinné

- ① Pseudoinverse matic souvisí s metodou nejmenších čtverců, viz Dodatek C *skript*.

Metoda nejmenších čtverců slouží k „proložení optimální křivky“ naměřenými daty s nejmenší kvadratickou chybou.

- ② Latentní sémantické indexování databází (také: LSI), viz Dodatek G *skript*.

Pro databáze lze vytvořit vektorový model a SVD rozklad lze použít k vyhledání skrytých sémantických konceptů v databázi.

- ③ Analýza hlavní komponenty (také: PCA), viz Dodatek G *skript*.

Při analýze multidimensionálních dat lze objevit „hlavní komponenty dat“, tj. lze nalézt podstatné naměřené veličiny.

- ④ A mnoho dalších aplikací...