Singulärwertzerlegung

basierend auf Kapitel 6 aus
Matrix Methods in Data Mining and Pattern Recognition
von Lars Eldén

Rafael Dewes

Präsentation im Rahmen des Proseminars:
Matrixmethoden in Datenanalyse und Mustererkennung
Wintersemester 2015/2016

25. November 2015

Warum?

Bild: *https://openclipart.org/detail/191766/question-guy*

Motivation

- Zerlegung von Matrizen in „Einfachere“
- QR-Zerlegung unterscheidet Reihen und Spalten
- Zerlegung in Eigenwerte nur bei diagonalisierbaren Matrizen

Motivation

- Zerlegung von Matrizen in „Einfachere“
- QR-Zerlegung unterscheidet Reihen und Spalten
- Zerlegung in Eigenwerte nur bei diagonalisierbaren Matrizen

- mehr Informationen aus *beliebigen* Matrizen

Die Zerlegung

Definition (Singulärwertzerlegung) (engl. Singular Value Decomposition)

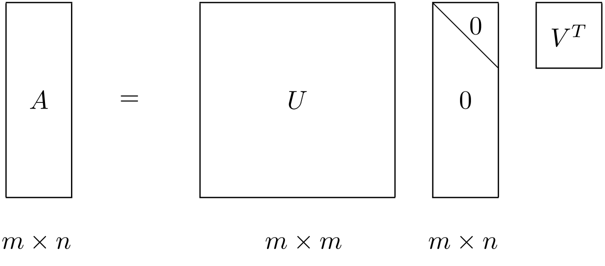
Sei A *eine* $m \times n$ *−Matrix mit* $m \geq n$.
Dann lässt A *sich darstellen als*

$$A = U \begin{pmatrix} \Sigma \\ 0 \end{pmatrix} V^T,$$

$U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *orthogonal und* $\Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *diagonal*,

$$\Sigma = diag(\sigma_1, \sigma_2, ..., \sigma_n),$$

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_n \geq 0.$$



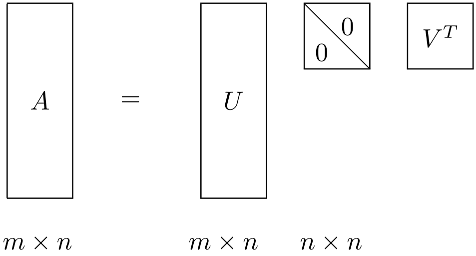
Symbolische Darstellung der Singulärwertzerlegung

Begriffe

Singulärwerte von $A \widehat{=} \sigma_i$ (Diagonaleinträge von Σ)

linksseitige Singulärvektoren $\widehat{=} u_i$ (Spaltenvektoren von U)

rechtsseitige Singulärvektoren $\widehat{=} v_i$ (Spaltenvektoren von V)



Symbolische Darstellung der dünnen Singulärwertzerlegung

$$U \ ist\ partitioniert\ in\ U_1,\ U_2;\ \ U_1\ \epsilon\mathbb{R}^{m\times n}$$
$$A = U_1 \Sigma V^T.$$

Äußere Produktform

Wir können die Zerlegung auch schreiben wie folgt:

$$A = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T,$$

$$Singulärwerte\ \sigma_i > 0,\ u_i,\ v_i\ Singulärvektoren.$$

Matrixnorm mit Singulärwertzerlegung

Satz

Die 2-Norm einer Matrix ist gegeben durch

$$\|A\|_2 = \sigma_1 \ .$$

Unterräume nach Zerlegung

Die Singulärwerte einer Matrix A mit Rang r sind

$$\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_r \geq \sigma_{r+1} = ... = \sigma_n = 0$$

Unterräume nach Zerlegung

Die Singulärwerte einer Matrix A mit Rang r sind

$$\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_r \geq \sigma_{r+1} = ... = \sigma_n = 0$$

Das Bild der Matrix A ist der Unterraum

$$im(A) = \{ \, y \, | \, y = Ax, \; x \, beliebig \, \}.$$

Unterräume nach Zerlegung

Die Singulärwerte einer Matrix A mit Rang r sind

$$\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_r \geq \sigma_{r+1} = ... = \sigma_n = 0$$

Das Bild der Matrix A ist der Unterraum

$$im(A) = \{\, y \,|\, y = Ax,\ x\, beliebig \,\}.$$

Der Kern der Matrix A ist der Unterraum

$$ker(A) = \{\, x \,|\, Ax = 0 \,\}.$$

Satz (Wichtige Unterräume)

Satz (Wichtige Unterräume)

1. *Die Singulärvektoren* $u_1, u_2, ..., u_r$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $im(A)$ *und*

   $$rang(A) = dim(im(A)) = r.$$

Satz (Wichtige Unterräume)

1. *Die Singulärvektoren* $u_1, u_2, ..., u_r$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $im(A)$ *und*

   $rang(A) = dim(im(A)) = r.$

2. *Die Singulärvektoren* $v_{r+1}, v_{r+2}, ..., v_n$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $ker(A)$ *und*

   $dim(ker(A)) = n - r.$

Satz (Wichtige Unterräume)

1. *Die Singulärvektoren* $u_1, u_2, ..., u_r$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $im(A)$ *und*

   $rang(A) = dim(im(A)) = r$.

2. *Die Singulärvektoren* $v_{r+1}, v_{r+2}, ..., v_n$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $ker(A)$ *und*

   $dim(ker(A)) = n - r$.

3. *Die Singulärvektoren* $v_1, v_2, ..., v_r$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $im(A^T)$.

Satz (Wichtige Unterräume)

1. *Die Singulärvektoren* $u_1, u_2, ..., u_r$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $im(A)$ *und*

   $rang(A) = dim(im(A)) = r$.

2. *Die Singulärvektoren* $v_{r+1}, v_{r+2}, ..., v_n$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $ker(A)$ *und*

   $dim(ker(A)) = n - r$.

3. *Die Singulärvektoren* $v_1, v_2, ..., v_r$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $im(A^T)$.

4. *Die Singulärvektoren* $u_{r+1}, u_{r+2}, ..., u_m$ *bilden eine Orthonormalbasis von* $ker(A^T)$.

Approximieren einer Matrix

Annahme: A ist Niedrigrang-Matrix mit Störung N.
$A = A_0 + N$, Mit $rang(A_0)$ A approximieren:
Sei k Zahl der großen Singulärwerte ($numerischer\ Rang$).

$$A = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T \approx \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T =: A_k.$$

Approximierung mit Singulärwerten

Satz (Approximation)

$$Sei\ A \in \mathbb{R}^{m \times n}\ mit\ Rang\ r > k.$$

$$\min_{rang(Z)=k} \|A - Z\|_2\ \ hat\ die\ Lösung:$$

Approximierung mit Singulärwerten

Satz (Approximation)

$$Sei\ A \,\epsilon\, \mathbb{R}^{m\times n}\ mit\ Rang\ r > k.$$

$$\min_{rang(Z)=k} \|A - Z\|_2 \;\; hat\ die\ Lösung:$$

$$Z = A_k := U_k \Sigma_k V_k^T,$$

$$mit\, U_k = (u_1, ..., u_k), V_k = (v_1, ..., v_k), \Sigma_k = diag(\sigma_1, ..., \sigma_k)$$

Approximierung mit Singulärwerten

Satz (Approximation)

$$Sei\ A \,\epsilon\, \mathbb{R}^{m\times n}\ mit\ Rang\ r > k.$$

$$\min_{rang(Z)=k} \|A - Z\|_2\ \ hat\ die\ Lösung:$$

$$Z = A_k := U_k \Sigma_k V_k^T,$$

$$mit\ U_k = (u_1, ..., u_k), V_k = (v_1, ..., v_k), \Sigma_k = diag(\sigma_1, ..., \sigma_k)$$

$$Das\ Minimum\ ist\ \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

Hauptkomponentenanalyse

- auch *Karhunen-Loève-Transformation*.
- kann mit Hauptachsentransformation erreicht werden.
- Für

$$X \epsilon \mathbb{R}^{m\times n},\ X = U\Sigma V^T \text{ gilt}$$

Hauptkomponentenanalyse

- auch *Karhunen-Loève-Transformation*.
- kann mit Hauptachsentransformation erreicht werden.
- Für

$$X \in \mathbb{R}^{m \times n},\ X = U\Sigma V^T \text{ gilt}$$

$$z_1 = Xv_1 = \sigma_1 u_1$$

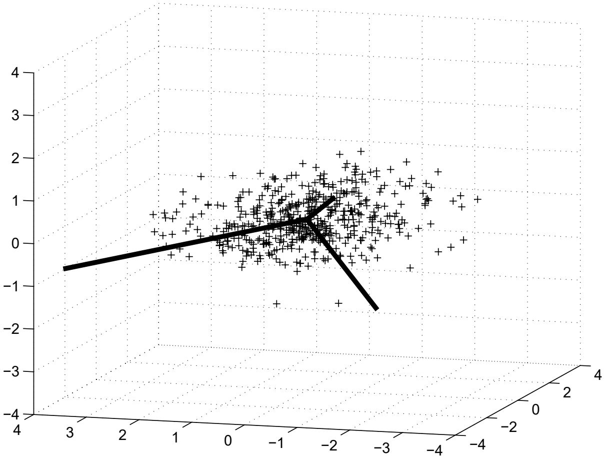
Hauptkomponentenanalyse

- auch *Karhunen-Loève-Transformation*.
- kann mit Hauptachsentransformation erreicht werden.
- Für

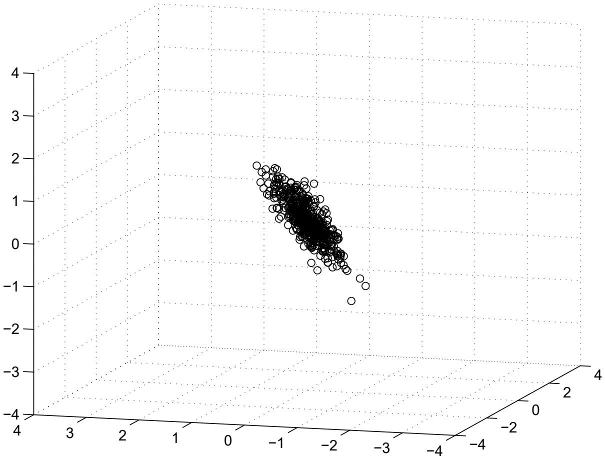
$$X \epsilon \mathbb{R}^{m \times n},\ X = U \Sigma V^T \text{ gilt}$$

$$z_1 = X v_1 = \sigma_1 u_1$$

$$u_1 = \left(\frac{1}{\sigma_1}\right) X v_1$$



Punktmenge im $\mathbb{R}^3$ *mit skalierten Hauptkomponenten*



Punkte nach der ersten Hauptkomponente ausgerichtet

Inhaltsverzeichnis

Die Zerlegung

Approximation von Matrizen mit SVD

Lösung der Methode der kleinsten Quadrate

- Lösung mit Singulärwertzerlegung
- Lösung für rangdefekte oder unterbestimmte Gleichungssysteme

Zusammenfassung

Literatur

Lösung zur Methode der kleinsten Quadrate

Gleichungssystem $Ax \sim b$.

Für A mit vollem Spaltenrang ist die SVD

$$A = (U_1 \; U_2) \begin{pmatrix} \Sigma \\ 0 \end{pmatrix} V^T,$$

mit $U_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Lösung

Satz (Lösung der kleinsten Quadrate mit SVD)

Die Methode der kleinsten Quadrate hat für

$$min_x \|Ax - b\|_2 \text{ die eindeutige Lösung}$$

$$x = V\Sigma^{-1}U_1^T b = \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i.$$

Konditionszahl

Für eine Matrix A mit Rang r und den Singulärwerten

$$\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = ... = \sigma_p = 0,$$

wobei $p = min(m, n)$, ist die Konditionszahl definiert als

$$\kappa(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r}.$$

Lösung für rangdefekte Gleichungssysteme

Ist A rangdefekt, d.h. $rang(A) = r < \min(m, n)$, ist die Lösung nicht mehr eindeutig.
Die Problemstellung

$$\min_{x \,\epsilon\, \mathcal{L}} \|x\|_2, \; \mathcal{L} = \{x \,|\, \|Ax - b\|_2 = min\},$$

hat aber die eindeutige Lösung:

$$x = V \begin{pmatrix} \Sigma_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T b = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b.$$

Lösung für unterbestimmte Gleichungssysteme

Ist A unterbestimmt, d.h. mehr Unbekannte als Gleichungen, gibt es keine eindeutige Lösung.
Die Problemstellung

$$\min_{x \,\epsilon\, \mathcal{K}} \|x\|_2,\ \mathcal{K} = \{x \mid Ax - b\},$$

hat aber die eindeutige Lösung:

$$x = V_1 \Sigma^{-1} U^T b.$$

Zusammenfassung

- SVD zerlegt beliebige Matrix in $U\Sigma V^T$
- enthält sehr viel Information
- deswegen für viele Probleme nutzbar
- ist unter Umständen teuer zu berechnen
- kann aber approximiert werden

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit

Literaturverzeichnis

1. L. Eldén: Matrix methods in data mining and pattern recognition. Volume 4, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2007.
2. Labs, Schreyer: Mathematik für Informatiker Teil 1, 2 und 3 Skript
3. Wikipedia: *https://de.wikipedia.org/wiki/Singul%C3%A4rwertzerlegung*
4. Bild auf Folie 2: *https://openclipart.org/detail/191766/question-guy*