

11. Primeri uporabe singularnega razcepa

Bor Plestenjak

NLA

23. marec 2015

Motivacija - prepoznavanje ročno izpolnjenih števil

Ročno izpolnjene številke imamo na voljo kot črno-bele slike velikosti 16×16 . Na voljo imamo vzorec 1707 števil, da se naučimo prebrati preostalih 2007 števil.



Metoda glavnih komponent

Denimo, da imamo n vektorjev $x_1, \dots, x_n$ iz $\mathbb{R}^m$.

Pri analizi glavnih komponent oz. **PCA (principal component analysis)** želimo opisati razpršenost n enot v m razsežnem prostoru z množico nekoreliranih spremenljivk - komponent, ki so linearne kombinacije originalnih merjenih spremenljivk.

V bistvu gre za ortogonalno transformacijo baze, kjer so nove nove spremenljivke urejene od najbolj do najmanj pomembne. Tako nova prva komponenta pojasnjuje kar največ razpršenosti osnovnih podatkov.

Običajni cilj te analize je poiskati nekaj glavnih komponent, ki pojasnjujejo večji del razpršenosti podatkov. Tako lahko zmanjšamo razsežnost podatkov in pri tem izgubimo čim manj informacij.

Korelacijska matrika

Denimo, da imamo n vektorjev $x_1, \dots, x_n$ iz $\mathbb{R}^m$, ki predstavljajo meritve m komponent oz. podatkov. Zanima nas, kako so ti podatki medsebojno odvisni oziroma korelirani.

Če sta $y, z \in \mathbb{R}^n$, potem je

$$\text{cor}(y, z) = \frac{1}{n}(y - \bar{y})^T(z - \bar{z}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})(z_j - \bar{z}).$$

Iz $x_1, \dots, x_n$ sestavimo matriko

$$X = \begin{bmatrix} x_1 - \bar{x} & \cdots & x_n - \bar{x} \end{bmatrix},$$

kjer je $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$. Sedaj je t.i. **korelacijska matrika** dimenzije $m \times m$ enaka

$$C = \frac{1}{n} X X^T.$$

Glavne komponente iz korelacijske matrike

Korelacijska matrika $C = \frac{1}{n}XX^T$ je simetrična nenegativno definitna in se da diagonalizirati kot

$$C = UDU^T,$$

kjer je $D = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots)$, U ortogonalna, lastne vrednosti pa uredimo po velikosti od največje do najmanjše.

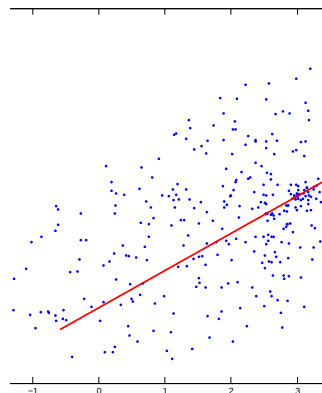
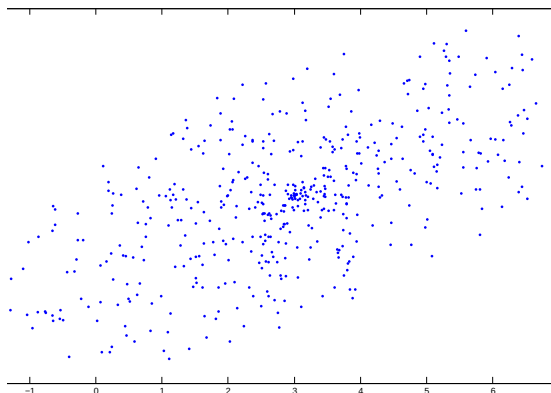
Glavnih d komponent je sedaj podanih z lastnimi vektorji $u_1, \dots, u_d$.

Stabilneje je to izračunati iz singularnega razcepa matrike $A = \frac{1}{\sqrt{n}}X$.

Če je $n \geq m$, izračunamo singularni razcep matrike $n \times m$ $A = U\Sigma V^T$, če pa je $n < m$, izračunamo singularni razcep za A^T in transponiramo matriki U in V .

Zgled

Imamo množico točk v ravnini. Sestavimo matriko $A = [x - \bar{x} \ y - \bar{y}]^T$ in preko SVD določimo glavne komponente.



Prepoznavanje ročno izpolnjenih poštних števil

PCA lahko uporabimo za razpoznavanje oblik. Ročno izpolnjene številke imamo na voljo kot črno-bele slike velikosti 16×16 . Na voljo imamo vzorec 1707 števil, ki jih poznamo in jih uporabimo, da določimo glavne podprostore, ter 2007 števil, ki jih je potrebno razbrati.



Prepoznavanje ročno izpolnjenih poštних števil

Vsako sliko 16×16 predstavimo z vektorjem dolžine 256. Za vsako skupino cifr od 0 do 9 sestavimo matriko, katere stolpci so vektorji iz testnega vzorca, ki so slike ustrezne cifre.

Za matriko izračunamo singularni razcep in vzamemo podprostor U_c , ki ga določa prvih nekaj (5–20) singularnih vektorjev.

Razpoznavanje vektorja z naredimo tako, da izračunamo normo projekcije z na U_c za $c = 0, \dots, 9$, potem pa izberemo tisto številko, kjer je bila norma največja.

Za sistem oblike $Ax = b$, kjer je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in $m < n$, pravimo, da je nedoločen.

Tudi v tem primeru kot rešitev vzamemo tisti x , ki minimizira $\|Ax - b\|_2$ in ima izmed vseh takšnih x najmanjšo normo $\|x\|_2$.

Rešitev je $x = A^+b$.

Za poljuben linearni sistem $Ax = b$ je prava rešitev $x = A^+b$.

Teorija motenj za predoločen sistem

Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, kjer je $m \geq n$ in $\text{rang}(A) = n$, matrika iz predoločenega sistema. Za takšno matriko definiramo občutljivost kot

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^+\|_2 = \frac{\sigma_1(A)}{\sigma_n(A)}.$$

Izrek

Dana je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, kjer je $m \geq n$ in $\text{rang}(A) = n$. Naj bo $x = A^+ b$ rešitev predoločenega sistema in $r = Ax - b$. Naj bo $\tilde{x} = (A + \delta A)^+(b + \delta b)$, kjer je

$$\epsilon := \max \left(\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}, \frac{\|\delta b\|_2}{\|b\|_2} \right) < \frac{1}{\kappa_2(A)}.$$

Potem je matrika $A + \delta A$ ranga n in velja

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\epsilon \kappa_2(A)}{1 - \epsilon \kappa_2(A)} \left(2 + (\kappa_2(A) + 1) \frac{\|r\|_2}{\|A\|_2 \|x\|_2} \right).$$

Primerjava metod za LS - razcep Choleskega

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\epsilon \kappa_2(A)}{1 - \epsilon \kappa_2(A)} \left(2 + (\kappa_2(A) + 1) \frac{\|r\|_2}{\|A\|_2 \|x\|_2} \right).$$

Število operacij za normalni sistem in razcep Choleskega je $mn^2 + n^3/3$.

Za numerično izračunano rešitev $\tilde{x}$ velja $(A^T A + E)\tilde{x} = A^T b$, kjer je $\|E\|_2 \leq C_1 mnu \|A^T A\|_2$.

Od tod sledi ocena, da za izračunano rešitev $\tilde{x}$ velja

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \kappa_2(A^T A) \frac{\|E\|_2}{\|A^T A\|_2} = \mathcal{O}(mnu) \kappa_2^2(A).$$

Pri reševanju preko normalnega sistema tako vedno v oceni napake vektorja $\tilde{x}$ nastopa faktor $\kappa_2^2(A)$, ne glede na velikost norme ostanka $\|r\|_2$.

Primerjava metod za LS - QR razcep

Če uporabimo QR razcep in npr. Householderjeva zrcaljenja, potem porabimo $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$ operacij.

Za izračunani $\tilde{x}$ velja, da je eksaktna rešitev po metodi najmanjših kvadratov za matriko $A + \delta A$ in desno stran $b + \delta b$, kjer je $\|\delta A\|_F \leq \mathcal{O}(mnu)\|A\|_F$ in $\|\delta b\|_2 \leq \mathcal{O}(mnu)\|b\|_2$.

Tako dobimo oceno

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_2}{\|x\|_2} \leq \mathcal{O}(mnu)\kappa_2(A) \left(2 + (\kappa_2(A) + 1) \frac{\|r\|_2}{\|A\|_2\|x\|_2} \right).$$

Težave z majhnimi singularnimi vrednostmi

Trditev

Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $A = U\Sigma V^T$ singularni razcep in $\sigma_n > 0$.

❶ Če je x rešitev predločenega sistema $Ax = b$ po m.n.k., potem je

$$\|x\|_2 \geq \frac{|u_n^T b|}{\sigma_n}.$$

❷ Če b zmotimo v $b + \delta b$, se x spremeni v $x + \delta x$, kjer je $\|\delta x\|_2 \leq \frac{\|\delta b\|_2}{\sigma_n}$.

V primeru, ko je $\text{rang}(A) = r < n$ za rešitev $Ax = b$ po m.n.k. velja

$$x = \sum_{i=1}^r \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i,$$

torej je $\|x\|_2 \leq \frac{\|b\|_2}{\sigma_r}$ in sprememba b v $b + \delta b$ spremeni rešitev kvečjemu za $\frac{\|\delta b\|_2}{\sigma_r}$.

Regularizacija

Rešujemo linearni sistem $Ax = b$, kjer je A nesingularna, a zelo občutljiva matrika velikosti $n \times n$. Predpostavimo še, da v resnici rešujemo sistem z zmoteno desno stranjo $\tilde{b}$, kjer so poleg b prisotne še majhne motnje, npr. zaradi meritev ali zaokrožitvenih napak. Rešitev zmotenega sistema $\tilde{x}$ lahko s pomočjo singularnega razcepa $A = U\Sigma V^T$ izrazimo kot

$$\tilde{x} = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T \tilde{b}}{\sigma_i} v_i,$$

kjer $\tilde{x}$ razvijemo po singularnih vektorjih $v_1, \dots, v_n$.

Če ima matrika A najmanjše singularne vrednosti zelo blizu 0, potem vemo, da lahko zelo majhna motnja desne strani povsem pokvari rezultat, kar pomeni, da se lahko $\tilde{x}$ močno razlikuje od x . Tovrstne težave rešujemo z **regularizacijo**. Splošni nastavek je, da za regularizirano rešitev x_{reg} vzamemo

$$x_{\text{reg}} = \sum_{i=1}^n \phi_i \frac{u_i^T \tilde{b}}{\sigma_i} v_i,$$

kjer so ϕ_i , $i = 1, \dots, n$, tako imenovani **faktorji filtra**.

Pri TSVD (truncated SVD) izberemo k in vzamemo

$$\phi_i = \begin{cases} 1 & : \quad 1 \leq k \leq i \\ 0 & : \quad k + 1 \leq i \leq n \end{cases}$$

To pomeni, da matriko A nadomestimo z matriko A_k , ki je najboljša aproksimacija matrike A z matriko ranga k , potem pa vzamemo

$$x_{\text{reg}} = A_k^+ b.$$

Ker smo zanemarili majhne singularne vrednosti, je to obratno stabilno in dobljena rešitev je točna rešitev bližnjega problema.

Regularizacija Tihonova

Izberemo regularizacijski parameter $\alpha > 0$ in za $i = 1, \dots, n$ definiramo faktorje

$$\phi_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \alpha^2}.$$

Lema

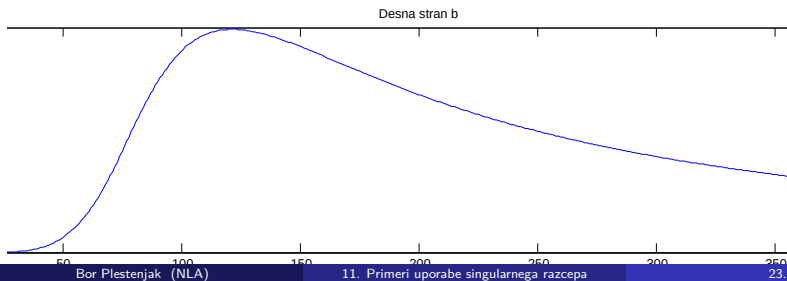
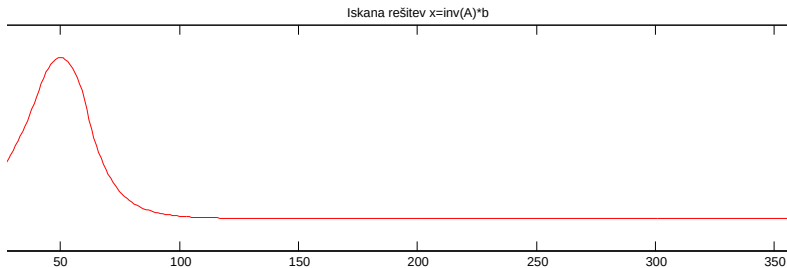
Regularizacija Tihonova s parametrom α vrne vektor x , ki reši naslednji problem:

$$\min_x \{ \|b - Ax\|_2^2 + \alpha^2 \|x\|^2 \}.$$

Vrednost parametra α moramo primerno izbrati:

- Če pošljemo α proti 0, potem bo x kar rešitev sistema $Ax = b$, a ker je v b tudi šum, lahko pričakujemo, da bo norma dobljenega vektorja zelo velika.
- Če vzamemo velik α , potem je bolj bistveno to, da ima x majhno normo, kot to, da reši sistem $Ax = b$.
- Pri primerni izbiri α norma izračunanega vektorja x ne bo prevelika in hkrati tudi velikost ostanka $b - Ax$ ne bo prevelika.

Zgled - inverse heat problem



Analiza časovnih vrst z metodo SSA

Naj bo $F = (f_0, f_1, \dots, f_{N-1})$ časovna vrsta dolžine N .

Za velikost okna L definiramo vektorje $x_j = [f_{j-1}, \dots, f_{j+L-2}]^T \in \mathbb{R}^L$ za $j = 1, \dots, K$, kjer je $K = N - L + 1$, in iz njih sestavimo matriko

$$X = [x_1 \ \cdots \ x_K].$$

Matrika X je Hankelova, saj ima na vsaki diagonalni konstantne vrednosti. Iz singularnega razcepa X dobimo $X = \sum_{k=1}^m X_k$, kjer so X_k matrike ranga 1.

Če razdelimo matrike ranga 1 v skupine, dobimo $X = \sum_{k=1}^m X_{I_k}$, kjer je $X_{I_k} = \sum_{i \in I_k} X_i$.

Od tod dobimo SSA (singular spectrum analysis) razcep časovne vrste, ki jo pišemo kot $f_n = \sum_{k=1}^m f_n^{(k)}$, kjer za vsak k vrsto $f_n^{(k)}$ dobimo s Hankelizacijo X_{I_k} .

Pri Hankelizaciji poiščemo najbližjo Hankelovo matriko, kar v bistvu pomeni, da na vsaki diagonalni elemente nadomestimo s povprečjem te diagonale.

S primerno izbiro skupin in L lahko iz podatkov izluščimo periodične trende.

Odstranjevanje šuma iz fotografij



$X \in \mathbb{R}^{m \times n}$: originalna oziroma željena ostra slika

$B \in \mathbb{R}^{m \times n}$: dejanska slika, ki jo imamo na voljo in bi jo radi izboljšali

Preprost linearni model pravi, da je zameglitev vrstic neodvisna od zameglitve stolpcev. Tedaj obstajata obrnljivi matriki $A_c \in \mathbb{R}^{m \times m}$ in $A_r \in \mathbb{R}^{n \times n}$, da je

$$A_c X A_r^T = B.$$

Če poznamo A_c in A_r , bi lahko izračunali $X = A_c^{-1} B A_r^{-1}$.

To se ne izkaže ta dober pristop, saj v resnici slika B vsebuje še dodaten šum E , tako da v resnici računamo z matriko $B + E$ in dobimo

$$X_n = A_c^{-1} (B + E) A_r^{-1} = X + A_c^{-1} E A_r^{-1}.$$

Če uporabimo regularizacijo s TSVD, namesto A_c^{-1} in A_r^{-1} uporabimo $(A_c)_k^+$ in $(A_r)_k^+$, kjer sta $(A_c)_k$ in $(A_r)_k$ matriki ranga k , ki sta najbližji A_c in A_r .

Splošen linearni model

Iz stolpcev $X = [x_1 \cdots x_n]$ in $B = [b_1 \cdots b_n]$ sestavimo vektorja x in b iz $\mathbb{R}^{mn}$:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Linearni model zamegljevanja pomeni, da je $Ax = b$.

Potem dobimo $x_n = A^{-1}(b + e) = x + A^{-1}e$, kjer je e vektor šuma. Če uporabimo singularni razcep matrike A , dobimo

$$A^{-1}e = \sum_{i=1}^{mn} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} v_i.$$

Če iz stolpcev v_i sestavimo slike V_i , dobimo

$$X_n = B + \sum_{i=1}^{mn} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} V_i.$$

$$X_n = B + \sum_{i=1}^{mn} \frac{u_i^T e}{\sigma_i} V_i.$$

Za splošen linearni model zamegljevanja lahko predpostavimo:

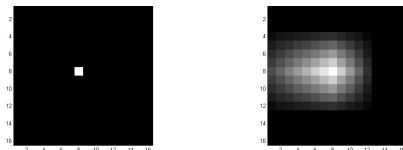
- Komponente šuma $|u_i^T e|$ so majhne in približno enakega velikostnega razreda za vse i ,
- Singularne vrednosti matrike A padajo proti vrednosti zelo blizu 0, občutljivost $\kappa_2(A) = \sigma_1(A)/\sigma_{mn}(A)$ je zelo velika,
- Singularni vektorji, ki pripadajo manjšim singularnim vrednostim, predstavljajo visoko frekvenčne podatke (pri večjem i vektorji u_i in v_i vse bolj spreminjajo predznak).

Funkcija zamegljevanja

Do nejasne končne slike pride zaradi različnih vzrokov, npr.:

- optični sistem ni izostren,
- premikanje objekta ali kamere,
- atomsferske motnje

V modelu $Ax = b$ motnjo i -tega piksla predstavlja i -ti stolpec matrike A . Če predpostavimo, da pri vseh točkah pride do enake vrste motnje, potem je zadosti poznati, kaj se zgodi z eno točko:



Tako zadošča poznati majhno matriko P , ki se bločno ponavlja po matriki A .

$$(A_r \otimes A_c) \text{vec}(X) = \text{vec}(A_c X A_r^T)$$

$$(A_r \otimes A_c)^T = A_r^T \otimes A_c^T$$

$$(A_r \otimes A_c)^{-1} = A_r^{-1} \otimes A_c^{-1}$$

$$(U_r \Sigma_r V_r^T) \otimes (U_c \Sigma_c V_c^T) = (U_r \otimes U_c)(\Sigma_r \otimes \Sigma_c)(V_r \otimes V_c)^T$$