4.6 Singularni razcep

Za $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, obstaja *singularni razcep*

$$A = U\Sigma V^T,$$

kjer sta $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ in $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonalni matriki in $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ oblike

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \\ & & \\ & & \end{bmatrix},$$

kjer so $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$ singularne vrednosti A.

A predstavlja preslikavo iz $\mathbb{R}^n$ v $\mathbb{R}^m$. Geometrijski pomen SV razcepa je, da se z ortogonalnima transformacijama baz U v $\mathbb{R}^m$ in V v $\mathbb{R}^n$ A spremeni v diagonalno matriko:

$$Av_i = \sigma u_i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

V primeru $n < m$ dobimo SV razcep tako, da transponiramo SV razcep za A^T.

Lastnosti singularnega razcepa

$A = U\Sigma V^T$

Lastne vrednosti A^TA so $\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2$. Ortonormirani lastni vektorji A^TA so desni singularni vektorji $v_1, \ldots, v_n$.

Lastne vrednosti AA^T so $\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2, \underbrace{0, \ldots, 0}_{m-n}$. Ortonormirani lastni vektorji AA^T so levi singularni vektorji $u_1, \ldots, u_m$.

Naj bo $\sigma_r > 0$ in $\sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0$. Če razdelimo

- $V = [V_1 \ V_2]$, kjer je $V_1 := [v_1 \ \cdots \ v_r]$ in $V_2 := [v_{r+1} \ \cdots \ v_n]$,
- $U = [U_1 \ U_2]$, kjer je $U_1 := [u_1 \ \cdots \ u_r]$ in $U_2 := [u_{r+1} \ \cdots \ u_m]$,

potem velja:

- r se ujema z rang(A),
- stolpci U_1 tvorijo bazo za im$A$,
- stolpci V_2 tvorijo bazo za $\ker A$,
- stolpci U_2 tvorijo bazo za $\ker A^T$,
- stolpci V_1 tvorijo bazo za imA^T.

Singularni razcep in predoločeni sistem

Lema 1. *Če je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \ge n$,* rang$(A) = n$, *potem je minimum $\|Ax - b\|_2$ dosežen pri*

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

Dokaz. Naj bo $A = U\Sigma V^T$ in

$$U = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \;\;n\;\; & m-n \end{array} \\ \begin{pmatrix} U_1 & \quad U_2 \end{pmatrix} \end{array}, \quad \Sigma = \begin{array}{c} n \\ m-n \end{array} \begin{pmatrix} S \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$\|Ax - b\|_2 = \|U\Sigma V^T x - b\|_2 = \|\Sigma V^T x - U^T b\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} SV^T x - U_1^T b \\ U_2^T b \end{bmatrix} \right\|_2.$$

Minimum je dosežen pri $SV^T x = U_1^T b$ oziroma

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

Najboljša aproksimacija z matriko nižjega ranga

Če je $A = U\Sigma V^T$ SV razcep A in je $\mathrm{rang}(A) = r$, potem direktno iz razcepa sledi

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^T.$$

Izrek 1. *Naj bo $A = U\Sigma V^T$ SV razcep A in $\mathrm{rang}(A) > k$. Naj bo $A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T$ oziroma $A_k = U\Sigma_k V^T$, kjer je*

$$\Sigma_k = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \sigma_k & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \\ & & & & & \end{bmatrix}.$$

Potem velja

$$\min_{\mathrm{rang}(B)=k} \|B - A\|_2 = \|A_k - A\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

To pomeni, da je A_k najboljša aproksimacija matrike A z matriko ranga k, σ_{k+1} pa nam pove, kako daleč je A od prostora matrik ranga k.

Zgled: uporaba SV razcepa za kompresijo podatkov

Zgled 1. *SV razcep lahko uporabimo za kompresijo slik. Sliko lahko predstavimo z matriko* A*, katere elementi predstavljajo nivo sivine. Namesto* A *vzamemo najboljšo aproksimacijo z matriko ranga* k*. Pri tem namesto* mn *podatkov potrebujemo le* $(m+n)k$ *podatkov za* $[u_1 \ \cdots \ u_k]$ *in* $[\sigma_1 v_1 \ \cdots \ \sigma_k v_k]$*.*

Moore-Penroseov psevdoinverz

Psevdoinverz je posplošitev inverza za matrike, ki bodisi niso kvadratne ali niso obrnljive.

Definicija 1. *Psevdoinverz matrike $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ je matrika $X \in \mathbb{R}^{n\times m}$, ki izpolnjuje Moore-Penroseove pogoje:*

1) $AXA = A$,
2) $XAX = X$,
3) $(AX)^T = AX$,
4) $(XA)^T = XA$.

(Moore-Penroseov) psevdoinverz matrike označimo z A^+.

Če je matrika kvadratna in obrnljiva, je

$$A^+ = A^{-1}.$$

Za matriko $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, rang$(A) = n$, dobimo

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T.$$

Povezava singularnega razcepa in psevdoinverza

Izrek 2. *Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, $\mathrm{rang}(A) = r$ in $A = U\Sigma V^T$, kjer je*

$$U = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} r & m-r \end{array} \\ \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \end{pmatrix} \end{array}, \quad V = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} \\ \begin{pmatrix} V_1 & V_2 \end{pmatrix} \end{array}, \quad \Sigma = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ m-r \end{array} & \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

in $S = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$. Potem je $A^+ = V\Sigma^+U^T$, kjer je

$$\Sigma^+ = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} r & m-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array} & \begin{pmatrix} S^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{array}.$$

Dokaz. Matriko A^+ lahko zapišemo kot $A = VBU^T$, kjer je

$$B = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} r & m-r \end{array} \\ \begin{array}{c} r \\ n-r \end{array} & \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \end{array}.$$

Iz Moore-Penroseovih pogojev sledi $B_{12} = 0$, $B_{21} = 0$, $B_{22} = 0$ in $B_{11} = S^{-1}$. ∎

4.7 Problemi defektnega ranga in nedoločeni problemi

Rešitev predoločenega sistema polnega ranga $Ax = b$ lahko zapišemo kot $x = A^+ b$.

Če A ni polnega ranga, pravimo, da ima *defekten rang*. V primeru defektnega ranga rešitev, ki minimizira $\|Ax - b\|_2$ ni enolična, saj lahko x prištejemo poljuben $z \in \ker A$. V takšnem primeru pravimo, da je izmed vseh x, ki minimizirajo $\|Ax - b\|_2$, rešitev tisti, ki ima minimalno normo.

Trditev 1. *Če je $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\mathrm{rang}(A) = r < n$ in $A = U\Sigma V^T$ singularni razcep, potem ima izmed vseh vektorjev x, ki minimizirajo normo $\|Ax - b\|_2$, najmanjšo normo $x = A^+ b$ oziroma*

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

in

$$\|Ax - b\|_2^2 = \sum_{i=r+1}^{m} (u_i^T b)^2.$$

Težave z majhnimi singularnimi vrednostmi

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

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

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

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

V primeru, ko je 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 največ 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 $\widetilde{b}$, kjer so poleg b prisotne še majhne motnje, npr. zaradi meritev ali zaokrožitvenih napak. Rešitev zmotenega sistema $\widetilde{x}$ lahko s pomočjo singularnega razcepa $A = U\Sigma V^T$ izrazimo kot

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

kjer $\widetilde{x}$ razvijemo po singularnih vektorjih $v_1, \ldots, v_n$.

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 $\widetilde{x}$ močno razlikuje od x. Tovrstne težave rešujemo z *regularizacijo*. Splošni nastavek je, da za regularizirano rešitev x_{reg} vzamemo

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

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

Odrezani singularni razcep

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

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

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

Primer v Matlabu

Regularizacija Tihonova

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

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

Lema 2. *Regularizacija Tihonova*[1] *s parametrom* α *vrne vektor* x*, ki reši naslednji problem:*

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

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.

[1] Ruski matematik Andrej Nikolajevič Tihonov (1906–1993) je postopek opisal leta 1943.