LMU München
Centrum für Informations- und Sprachverarbeitung
WS 10-11: 13.12.2010
HS Matrixmethoden im Textmining
Dozent: Prof.Dr. Klaus U. Schulz
Referat von: Erzsébet Galgóczy

Singulärwertzerlegung

1 Einleitung

Jede beliebige Matrix A kann in (sehr gut verarbeitbare) zwei orthogonale (sogar orthonormale) Matrizen U und V und eine diagonale Matrix Σ zerlegt werden.

Anders als z.B. bei der QR-Dekomposition wird sowohl der Zeilenraum, als auch der Spaltenraum einer $m \times n$-Matrix behandelt. Man findet orthonormale Basen $v_1, ..., v_r$[1] für den Zeilenraum und $u_1, ..., u_r$ für den Spaltenraum.

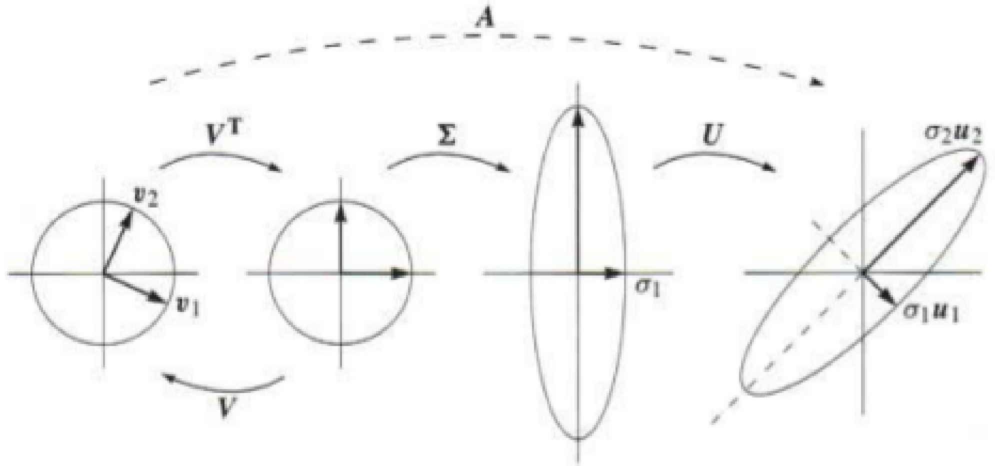


Figure 1: Die Basen U und V bewirken Drehungen und Spiegelungen. Die Diagonalmatrix Σ ist eine Streckmatrix.

1.1 Was heißt das?

Nimmt man eine $m \times n$-Matrix, so ist es nicht allzu schwer, im Zeilenraum aufeinander orthogonale Basisvektoren v_im d.h. eine orthonormale Basis V zu finden, etwa mit dem Gram-Schmidt-Verfahren. Es soll zusätzlich aber auch gelten, dass die Vektoren Av_i ebenfalls orthogonal sind, d.h. jedes A_i zeigt in die Richtung des jeweiligen Spaltenvektors u_i, der eventuell mit einem Skalar σ_i multipliziert werden muss. Mit anderen Worten: Wir suchen eine orthonormale Basis für A in $\mathbb{R}^n$, die in

[1] r ist die Dimension/der Rang der Matrix, d.h. in $\mathbb{R}^3$ gibt es v_1, v_2, v_3 etc.

eine ebenfalls orthonormale Basis in $\mathbb{R}^m$ überführt wird. Es gilt also für alle $v_1, ...v_r$ und $u_1, ..., u_r$ in A: $Av_i = \sigma_i u_i$, d.h. (Beispielschema mit $m = n = 2$):

$$A \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 & \sigma_2 \boldsymbol{u}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & \\ & \sigma_2 \end{bmatrix}.$$

d.h. in Matrixform:

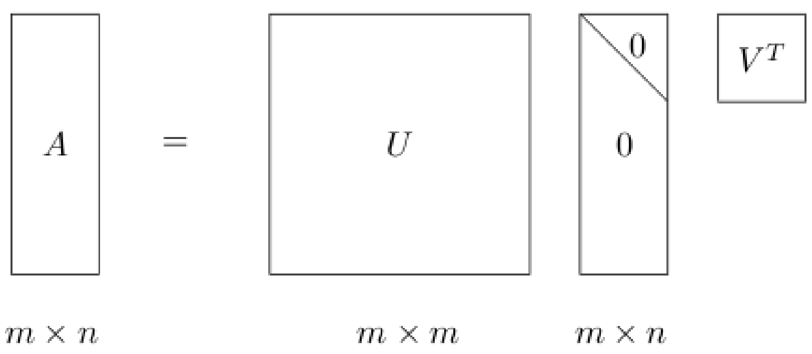
$$AV = U\Sigma \text{ oder } \mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V^T}$$

Die Spaltenvektoren von V und U, v_i und u_i nennt man *Singulärvektoren*, die Elemente σ_i der Diagonalmatrix Σ sind die *Singulärwerte.*

1.2 Warum geht es nicht mit weniger Faktoren?

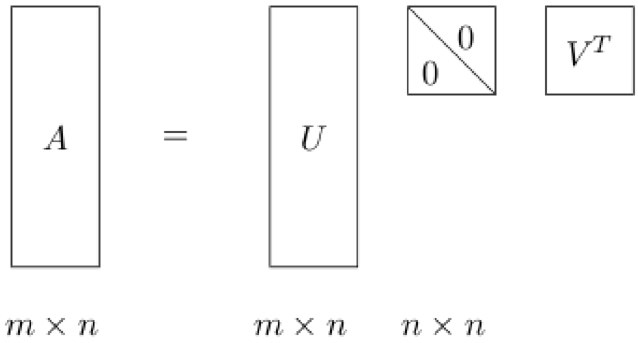
- Außer in Spezialfällen ist es nirgends garantiert, dass die Multiplikation einer Matrix A mit einer orthogonalen Basis zu einem ebenfalls orthogonalen Ergebnis führt. Wenn man nur *eine* orthogonale Basis Q wählt, ist $\Sigma = Q^{-1}AQ$ nicht diagonal[2]! (Es sei denn, A ist zufällig symmetrisch, positiv, und definit, dann gilt $A = Q\Sigma Q^T = Q\Lambda Q^T$).
- Die SVD soll für *beliebige* Matrizen gelten. In dem Sonderfall, falls A symmetrisch ist, kann man die Eigenvektoren der Matrix als Basen wählen. Bei nicht-symmetrischen Matrizen ist die Basis aus Eigenvektoren jedoch nicht orthonormal und man benötigt zwei verschiedene orthogonale Matrizen.

1.3 Schematische Darstellung einer SVD



Die Matrix U wird noch in U_1 und U_2 partitioniert, wobei $U_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$, sodass die *thin SVD* $A = U_1 \Sigma V^T$ lautet.

[2] Erinnerung: Da es sich um orthogonale Basen handelt, ist die Inverse stets gleich der transponierten Matrix. $Q^{-1} = Q^T$



2 Interpolation: Eigenwerte und Eigenvektoren

Eine *symmetrische, positive, definite* Matrix A hat orthogonale Eigenvektoren und positive Eigenwerte λ.

2.1 Was sind Eigenvektoren und Eigenwerte?

Wenn man einen beliebigen Vektor mit einer Matrix A multipliziert, so ändert er in der Regel seine Richtung. Bestimmte Vektoren x, die *Eigenvektoren* zeigen jedoch in dieselbe Richtung wie ihr Produkt Ax mit der Matrix. Es gilt also $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$, wobei λ ein sogenannter *Eigenwert* ist. Wenn man einen Vektor mit A multipliziert, wird dabei also jeder Eigenvektor mit seinem Eigenvert multipliziert.

Für alle Eigenwerte λ gilt: λ ist Eigenwert von A gdw. $\mathbf{det}(\lambda\mathbf{I_n} - \mathbf{A}) = \mathbf{0}$, also $A-\lambda I$ singulär ist (im trivialen Fall, dass der Eigenwert $= 0$ ist, liegt der Eigenvektor im Nullraum). Um die Eigenvektoren bei gegebenen Eigenwerten zu erhalten, gilt es, die Gleichung $Ax = \lambda x$, d.h. aufgelöst $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ für jedes λ zu lösen[3].

Weiterhin gilt: Das Produkt der n Eigenwerte ist gleich der Determinante von A.

2.2 Beispiel einer Eigenwert-Berechnung

Sei $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$ die Beispielmatrix. Da sie singulär ist, ist die Determinante $= 0$. Dadurch ist auch eine der Eigenwerte (2×2-Matrizen haben i.d.R. zwei Eigenwerte) Null.

Für die Berechnung des zweiten Eigenwertes wird zunächst $\lambda I = \left(\begin{smallmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{smallmatrix}\right)$ von A abgezogen: $A - \lambda I = \begin{bmatrix} 1-\lambda & 2 \\ 2 & 4-\lambda \end{bmatrix}$

Dann berechnet man die Determinante dieser Matrix (Für 2×2-Matrizen lautet die Formel $ad - bc$): $det \begin{bmatrix} 1-\lambda & 2 \\ 2 & 4-\lambda \end{bmatrix} = (1-\lambda)(4-\lambda) - (2)(2) = \lambda^2 - 5\lambda$; $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 5$

[3] Für kleine Matrizen können Eigenwerte auch per *trial and error* festgestellt werden.

$$
\begin{aligned}
(A - 0I)\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ liefert einen Eigenvektor} \\
\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ für } \lambda_1 = 0, \\
(A - 5I)\mathbf{x} = \begin{bmatrix} -4 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ liefert einen Eigenvektor} \\
\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \text{ für } \lambda_2 = 5.
\end{aligned}
$$

3 Berechnung der SVD einer Matrix

Sei $A = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$ eine Matrix. Wir suchen Vektoren v_1, v_2 im Zeilenraum, $\mathbb{R}^2$ und u_1, u_2 im Spaltenraum, $\mathbb{R}^2$ und zwei skalare Werte in einer Diagonalmatrix, $\sigma_1 > 0$, $\sigma_2 > 0$.

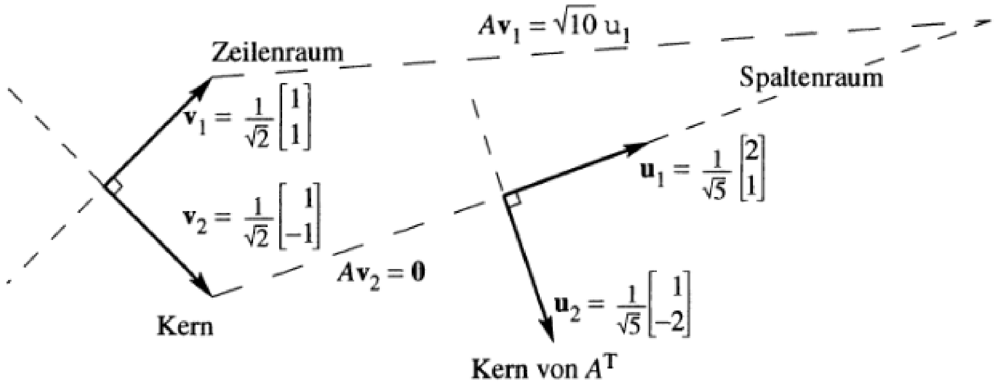


Figure 2: Bei der Singulärwertzerlegung wählt man Basen mit $Av_i = \sigma_1 u_i$

Um nun zuerst V zu berechnen, berechnet man die symmetrische Matrix

$$A^T A = (V\Sigma^T U^T)(U\Sigma V^T) = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}$$

mit den aufeinander senkrecht stehenden Eigenvektoren $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ und $\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Diese werden auf Einheitsvektoren normalisiert: $v_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$, $v_2 = \begin{bmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$.

Die Eigenwerte sind 8 und 2. Für AA^T wären es die gleichen, aber die Reihenfolge der Eigenwerte muss beachtet werden, d.h. der erste Eigenvektor wäre hier (1,0).

U kann durch Kürzen von AA^T gefunden werden, da $AA^T = (U\Sigma V^T)(V\Sigma^T U^T)$, oder durch Multiplikation von A mit v_1 und v_1, da diese in der gleichen Richtung wie u_1 und u_2 liegen.

$$Av_1 = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/\sqrt{2} \\ 0 \end{bmatrix} \text{ d.h. der Einheitsvektor ist } u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$Av_1 = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \end{bmatrix} \text{ d.h. der Einheitsvektor ist } u_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Da $Av_1 = 2\sqrt{2}u_1$ ist, ist der erste Singulärwert $\sigma_1 = 2\sqrt{2}$. Quadriert gibt das 8 – einen Eigenwert von A^TA. Analog gilt: $\sigma_2 = \sqrt{2}$, und $\sigma_2^2 = 2$, der zweite Eigenwert von A^TA.

Die vollständige Singulärwertzerlegung von A ist also $U\Sigma V^T$ bestimmt:

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} & \\ & \sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

4 Ergebnis

Mit der Singulärwertzerlegung werden orthogonale Basen für die 4 fundamentalen Unterräume einer beliebigen Matrix gefunden.

- $v_1, ..., v_r$: orthonormale Basis für den Zeilenraum (Dimension r)
- $u_1, ..., u_r$: orthonormale Basis für den Spaltenraum (Dimension r)
- $v_{r+1}, ..., v_n$: orthonormale Basis für den Nullraum von A, d.h. Kern von A (Dimension $n - r$)
- $u_{r+1}, ..., u_m$: orthonormale Basis für den Nullraum von A^T, d.h. Kern von A^T (Dimension $m - r$)

5 Anwendungen

In der Praxis findet man die Singulärwertzerlegung oft bei diversen approximativen Verfahren: Kompression etc.

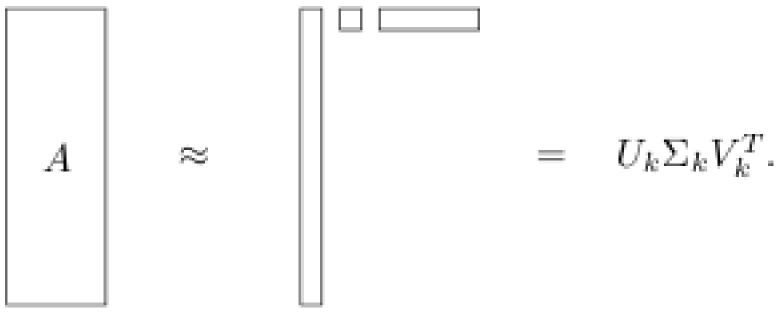
5.1 Matrix-Approximation

Wenn A eine Matrix mit niedrigem Rang und einem leichten Rauschen N ist, d.h. $A = A_0 + N$, wobei N im Vergleich zu A_0 sehr klein ist, wird die Anzahl der großen Singulärwerte oft als den *numerischen Rang* einer Matrix bezeichnet. Wenn man den korrekten Rang von A_0 feststellen kann, entweder durch Schätzung oder durch Untersuchung der Singulärwerte, kann man das Rauschen entfernen, indem man sich A durch eine Matrix mit dem korrekten Rang annähert.

D.h. wenn man die k größten Singulärwerte auswählt, und die ihnen entsprechenden Singulärvektoren aus U und V, erhält man die k-rangige Approximation zur Matrix mit der geringsten Error-Rate. Diese Norm ist die *Frobenius-Norm*.

5.2 Beispiel einer Anwendung: Bildkompression

Das Pixelraster eines digitalen Bildes ist im Grunde eine Matrix, wo jedes Pixel einen Eintrag in der Matrix repräsentiert und einen Wert trägt. Für ein 512x256-Bild hat man $512 = 2^9$ Pixel in jeder Zeile und $256 = 2^8$ Pixel in jeder Spalte, d.h. eine Matrix mit 2^{17} Einträgen.



Beim Komprimieren geht es darum, die Anzahl der Einträge zu verringern, ohne die Bildqualität groß zu verschlechtern. Natürlich kann man das Raster einfach vergröbern, z.B. Quadrate von jeweils 4 Pixeln zu einem Durchschnitts-Farb-Wert zusammenfassen. Dieses Verfahren führt aber schnell zu schlechten Ergebnissen. Wenn man aber Singulärwertzerlegung anwendet, ist es in idealen Fällen möglich, die Matrix auf Rang 1 zu reduzieren (oder, für bessere Ergebnisse, z.B. 5 Rang-1-Matrizen), was zu einer sehr guten Kompressionsrate führt.

Konkret heißt dies: Die beste Approximation zu der Originalmatrix A ist die Matrix $\boldsymbol{\sigma_1 u_1 v_1^T}$, d.h. der größte Singulärwert σ_1 und die dazu korrespondierenden Singulärvektoren u_1 und v_1.

Quellen

Eldén, Lars (2007). *Matrix Methods in Data Mining and Pattern Recognition.* Siam, Philadelphia.

Strang, Gilbert (2003). *Lineare Algebra.* Springer, Berlin.