Szinguláris érték felbontás
Singular Value Decomposition*

Borbély Gábor†

2017. április 2.

0.1. Tétel (teljes SVD)**.** Legyen $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ mátrix (valósra is jó), ekkor léteznek $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$ és $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ unitér mátrixok (valósban ortogonális) és $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ valós, nem-negatív elemű diagonális mátrix, hogy

$$A = U\Sigma V^H$$

(valós mátrix esetén $V^\top$ van adjungált helyett)

0.2. Tétel (szinguláris felbontás)**.** Legyen $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ mátrix melynek rangja $k \le \min(m,n)$, ekkor léteznek $\underline{u}_i \in \mathbb{C}^m$ és $\underline{v}_i \in \mathbb{C}^n$ vektorok és σ_i nem-negatív valós számok $i = 1\ldots k$-ig úgy, hogy

$$A = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \cdot \underline{u}_i \underline{v}_i^H$$

Ahol $\underline{u}_i$ vektorok, az A mátrix bal-szinguláris vektorai, ortonormált rendszert alkotnak, $\underline{v}_i$ a jobb-szinguláris vektorok és ezek is ortonormált rendszert alkotnak és σ_i a szinguláris értékek. Valamint $\underline{u}_i \underline{v}_i^H$ diád (diadikus) szorzat.

0.2.1. Megjegyzés. A fenti felbontás nem egyértelmű! Több U és V mátrix-pár is létezhet úgy, hogy $A = U\Sigma V^H$, de a szinguláris értékek (Σ) sorrendtől eltekintve egyértelműek!

0.2.2. Megjegyzés. A felbontásra két számolási eljárás:

- $B = A^\top A$
  1. B mátrixnak kiszámoljuk a sajátértékeit és sajátvektorait. Sajátvektorok, mint oszlopvektorok, lesznek a V' mátrixban, a szinguláris értékek pedig a B sajátértékeinek gyökei.
  2. $U' = AV'$
  3. U-t úgy kapjuk, hogy U' oszlopait normáljuk, V-t pedig úgy, hogy V' oszlopait normáljuk (leosztjuk a hosszukkal).
- $B = AA^\top$
  1. B mátrixnak kiszámoljuk a sajátértékeit és sajátvektorait. Sajátvektorok, mint oszlopvektorok, lesznek az U' mátrixban, a szinguláris értékek pedig a B sajátértékeinek gyökei.
  2. $V' = A^\top U'$
  3. U-t úgy kapjuk, hogy U' oszlopait normáljuk, V-t pedig úgy, hogy V' oszlopait normáljuk (leosztjuk a hosszukkal).

0.2.1. Feladat. Számítsuk ki az

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrix SVD felbontását!

Megoldás 1. Számítsuk ki $B = AA^\top$ sajátértékeit és sajátvektorait!

$$B = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 & 1 \\ 1 & 11 \end{pmatrix}$$

*https://www.youtube.com/watch?v=R9UoFyqJca8
†http://math.bme.hu/~borbely

Ennek sajátértékei:

$$\det \begin{pmatrix} 11-\lambda & 1 \\ 1 & 11-\lambda \end{pmatrix} = (11-\lambda)^2 - 1 =$$

$$120 - 22\lambda + \lambda^2$$

Ebből a sajátértékek: $\lambda_1 = 10, \lambda_2 = 12$. Vagyis a szinguláris értékek $\sqrt{10}$ és $\sqrt{12}$. $\lambda_1 = 10$-hez sajátvektor (első jobb-szinguláris vektor):

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{array}\right]$$

ennek egy nem-nulla megoldása a $(-1, 1)$ vektor.
A 12 sajátértékhez tartozó sajátvektor:

$$\left[\begin{array}{cc|c} -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{array}\right]$$

Vagyis a második jobb-szinguláris vektor az $(1, 1)$.

$$U' = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

A bal-szinguláris vektorok:

$$V' = A^\top U' = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 & 2 \\ 2 & 4 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

U és V úgy kapható meg, hogy U' és V' oszlopaikat normalizáljuk:

$$U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{10} & 0 \\ 0 & \sqrt{12} \end{pmatrix}$$

□

Megoldás 2. Számítsuk ki $B = A^\top A$ sajátértékeit és sajátvektorait!

$$B = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 2 \\ 0 & 10 & 4 \\ 2 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

Ennek sajátértékei:

$$\det \begin{pmatrix} 10-\lambda & 0 & 2 \\ 0 & 10-\lambda & 4 \\ 2 & 4 & 2-\lambda \end{pmatrix} = (10-\lambda)((10-\lambda)(2-\lambda) - 16) - 4(10-\lambda) =$$

$$-\lambda \cdot (120 - 22\lambda + \lambda^2)$$

Ebből a sajátértékek: $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 10, \lambda_3 = 12$. Vagyis a szinguláris értékek $0, \sqrt{10}$ és $\sqrt{12}$. A nullához nem is keresünk sajátvektort, mert a végeredményben úgyis nulla szorzóval szerepelne. $\lambda_2 = 10$-hez sajátvektor (első jobb-szinguláris vektor):

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 2 & 4 & -8 & 0 \end{array}\right]$$

ennek egy nem-nulla megoldása a $(-2, 1, 0)$ vektor.
A 12 sajátértékhez tartozó sajátvektor:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} -2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 \\ 2 & 4 & -10 & 0 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|c} -2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & -8 & 0 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|c} -2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & 0 \end{array}\right] \to$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 \end{array}\right]$$

Vagyis a második jobb-szinguláris vektor a $(1, 2, 1)$.

$$V' = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Ezt a mátrixot kiegészíthetnénk egy harmadik, ez előző kettőre ortogonális vektorral és bevehetnénk a 0 sajátértéket. Ekkor kapnánk teljes SVD-t, de ezt most nem tesszük meg.
A bal-szinguláris vektorok:

$$U' = AV' = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 & 6 \\ 5 & 6 \end{pmatrix}$$

U és V úgy kapható meg, hogy U' és V' oszlopaikat normalizáljuk:

$$U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{10} & 0 \\ 0 & \sqrt{12} \end{pmatrix}$$

Ugyan az jött ki, mint az első megoldásban, bár ez nem szükségszerű, mivel a felbontás nem egyértelmű.
Szinguláris felbontás alakban:

$$A = \sqrt{10} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \end{pmatrix}}_{\text{diád szorzat}} + \sqrt{12} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}}_{\text{diád szorzat}}$$

□

0.2.2. Feladat. Számoljunk az alábbi mátrixra SVD-t!

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Először

$$B = A^\top A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Ennek sajátértékei:

$$\det \begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 3-\lambda \end{pmatrix} = ((2-\lambda)^2 - 1)(3-\lambda) = (3 - 4\lambda + \lambda^2)(3-\lambda) = (3-\lambda)(1-\lambda)(3-\lambda)$$

Vagyis a sajátértékek: 1 és a 3 kétszeres. A szinguláris értékek: $1, \sqrt{3}, \sqrt{3}$. A jobb sajátvektorok közül először a $\lambda = 1$-hez tartozót:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{array}\right]$$

Ennek egy nem-nulla megoldása: $(-1, 1, 0)$.
Most a $\lambda = 3$-hoz:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

Ennek magtere (nulltere) két dimenziós. Ügyeljünk arra, hogy az összes független sajátvektort megtaláljuk! Sőt, szimmetrikus mátrix (amilyen B is) sajátvektorai merőlegesek is egymásra! Két lehetséges vektor: $(1, 1, 0)$ és $(0, 0, 1)$, így:

$$V' = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$U' = AV' = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Végezetül teljes SVD alakban:

$$U = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

0.2.3. Feladat. Számítsuk ki az

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mátrix SVD felbontását!

Megoldás. Számítsuk ki $B = A^\top A$ sajátértékeit és sajátvektorait!

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Ennek sajátértékei:

$$\det \begin{pmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Vegyük észre, hogy ez két pozitív szám. A szinguláris értékek ezek gyökei: $\sqrt{\frac{3\pm\sqrt{5}}{2}}$. Az első (gyök nélküli) sajátértékhez tartozó sajátvektor:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 - \frac{3+\sqrt{5}}{2} & 1 & 0 \\ 1 & 2 - \frac{3\pm\sqrt{5}}{2} & 0 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{cc|c} \frac{-1-\sqrt{5}}{2} & 1 & 0 \\ 1 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} & 0 \end{array}\right]$$

ennek egy nem-nulla megoldása az $(1, \frac{1+\sqrt{5}}{2})$ vektor. A másik sajátértékhez tartozó sajátvektort nem számítjuk ki, mert erre merőleges kell legyen, mert B mátrix ortogonálisan diagonalizálható. Így a másik sajátvektor: $(\frac{1+\sqrt{5}}{2}, -1)$. Ezzel megvannak a jobb-szinguláris vektorok, oszloponként mátrixba rendezve:

$$V' = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1+\sqrt{5}}{2} \\ \frac{1+\sqrt{5}}{2} & -1 \end{pmatrix}$$

Ez után a bal-szinguláris vektorok: $U' = AV'$

$$U' = \begin{pmatrix} \frac{3+\sqrt{5}}{2} & \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ \frac{1+\sqrt{5}}{2} & -1 \end{pmatrix}$$

U és V ezen mátrixokból úgy kapható meg, hogy oszlopaikat normalizáljuk, valamint

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} \end{pmatrix}$$

□

0.2.4. Feladat. Számítsunk SVD-t:

$$A = \begin{pmatrix} 2i & 1 \\ 2 & i \\ 1 & 2i \end{pmatrix}$$

$$B = A^H A = \begin{pmatrix} -2i & 2 & 1 \\ 1 & i & 2i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2i & 1 \\ 2 & i \\ 1 & 2i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 2i \\ -2i & 6 \end{pmatrix}$$

B-hez sajátérték, sajátvektor:

$$\det \begin{pmatrix} 9-\lambda & 2i \\ -2i & 6-\lambda \end{pmatrix} = (9-\lambda)(6-\lambda) - 4 =$$

$$\lambda^2 - 15\lambda + 50 = (\lambda - 5)(\lambda - 10)$$

A saját értékek: 5 és 10. Figyelmjük meg, hogy az eredeti mátrix és B is komplex, de B önadjungált és sajátértékei nem-negatív (valós) számok. A szinguláris értékek ezek gyökei: $\sqrt{5}$ és $\sqrt{10}$.
Az 5-höz tartozó sajátvektor:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 4 & 2i & 0 \\ -2i & 1 & 0 \end{array}\right]$$

Az első jobb-szinguláris vektor: $(-i, 2)$.
A 10-hez tartozó sajátvektor:

$$\left[\begin{array}{cc|c} -1 & 2i & 0 \\ -2i & -4 & 0 \end{array}\right]$$

A második jobb-szinguláris vektor: $(2i, 1)$, így:

$$V' = \begin{pmatrix} -i & 2i \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

A bal-szinguláris vektorok:

$$U' = AV' = \begin{pmatrix} 4 & -3 \\ 0 & 5i \\ 3i & 4i \end{pmatrix}$$

Normálás után:

$$U = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{-3}{5\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{3i}{5} & \frac{4i}{5\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{5} & 0 \\ 0 & \sqrt{10} \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} \frac{-i}{\sqrt{5}} & \frac{2i}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}.$$