

奇异值分解

维基百科，自由的百科全书

奇异值分解（singular value decomposition）是线性代数中一种重要的矩阵分解，在信号处理、统计学等领域有重要应用。奇异值分解在某些方面与对称矩阵或厄米矩阵基于特征向量的对角化类似。然而这两种矩阵分解尽管有其相关性，但还是有明显的不同。对称阵特征向量分解的基础是谱分析，而奇异值分解则是谱分析理论在任意矩阵上的推广。

目录

理論描述

直觀的解釋

奇异值和奇异向量，以及他们与奇异值分解的关系

例子

与特征值分解的联系

几何意义

应用

求伪逆

列空間、零空間和秩

矩阵近似值

幾種程式語言中计算SVD的函式範例

历史

参见

外部链接

参考文献

理論描述

假設M是一個m×n階矩陣，其中的元素全部屬於或K，也就是實數域或複數域。如此則存在一個分解使得

$$M = U \Sigma V^*,$$

其中U是m×m階酉矩陣；Σ是m×n階非負实数對角矩陣；而V*，即V的共軛轉置，是n×n階酉矩陣。這樣的分解就稱作M的**奇異值分解**。Σ對角線上的元素Σ_{i,i}即為M的**奇異值**。

常見的做法是将奇異值由大而小排列。如此便能由M唯一確定了。（雖然U和V仍然不能確定。）

直觀的解釋

在矩陣M的奇異值分解中

$$M = U \Sigma V^*,$$

- V的列（columns）組成一套對**M**的**正交**"輸入"或"分析"的基向量。這些向量是**M*** **M**的特徵向量。
- U的列（columns）組成一套對**M**的**正交**"輸出"的基向量。這些向量是**MM*** 的特徵向量。

- Σ 對角線上的元素是奇異值，可視為是在輸入與輸出間進行的純量的膨脹控制。這些是 MM^* 及 M^*M 的特征值的非負平方根，並與 U 和 V 的行向量相對應。

奇异值和奇异向量，以及他们与奇异值分解的关系

一个非负实数 σ 是 M 的一个奇异值仅当存在 K^m 的单位向量 u 和 K^n 的单位向量 v 如下：

$$Mv = \sigma u \text{ and } M^*u = \sigma v.$$

其中向量 u 和 v 分别为 σ 的左奇异向量和右奇异向量。

对于任意的奇异值分解

$$M = U\Sigma V^*$$

矩阵 Σ 的对角线上的元素等于 M 的奇异值. U 和 V 的列分别是奇异值中的左、右奇异向量。因此，上述定理表明：

- 一个 $m \times n$ 的矩阵至多有 $p = \min(m, n)$ 个不同的奇异值；
- 总能在 K^m 中找到由 M 的左奇异向量組成的一組正交基 U ，；
- 总能在 K^n 找到由 M 的右奇异向量組成的一組正交基 V ，。

如果對於一个奇异值，可以找到兩組线性無關的左（右）奇異向量，則該奇異值称为簡併的（或退化的）。

非退化的奇异值在最多相差一個相位因子 $\exp(i\phi)$ （若討論限定在實數域內，則最多相差一個正負號）的意義下具有唯一的左、右奇异向量。因此，如果 M 的所有奇异值都是非退化且非零，則除去一個可以同時乘在 U, V 上的任意的相位因子外， M 的奇異值分解唯一。

根据定义，退化的奇异值具有不唯一的奇异向量。因为，如果 u_1 和 u_2 为奇异值 σ 的两个左奇异向量，則它們的任意歸一化线性组合也是奇异值 σ 一个左奇异向量，右奇异向量也具有類似的性质。因此，如果 M 具有退化的奇异值，則它的奇异值分解是不唯一的。

例子

观察一个 4×5 的矩阵

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

M 矩阵的奇异值分解如下 $U\Sigma V^*$

$$U = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \Sigma = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, V^* = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sqrt{0.2} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.8} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{0.8} & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{0.2} \end{bmatrix}.$$

注意矩陣 Σ 的所有非對角元為0。矩阵 U 和 V^* 都是酉矩阵，它們乘上各自的共軛轉置都得到單位矩陣。如下所示。在这个例子中，由于 U 和 V^* 都是实矩陣，故它們都是正交矩阵。

$$UU^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv I_4$$

$$VV^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \sqrt{0.2} & 0 & \sqrt{0.8} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{0.8} & 0 & -\sqrt{0.2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sqrt{0.2} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.8} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{0.8} & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{0.2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv I_5.$$

由於 Σ 有一個對角元是零，故这个奇异值分解值不是唯一的。例如，選擇使得

$$V^* = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sqrt{0.2} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.8} \\ \sqrt{0.4} & 0 & 0 & \sqrt{0.5} & -\sqrt{0.1} \\ -\sqrt{0.4} & 0 & 0 & \sqrt{0.5} & \sqrt{0.1} \end{bmatrix}$$

能得到 M 的另一個奇異值分解。

与特征值分解的联系

奇异值分解能夠用于任意 $m \times n$ 矩阵，而特征分解只能适用于特定类型的方阵，故奇异值分解的適用範圍更廣。不过，这两个分解之间是有关联的。给定一个 M 的奇异值分解，根据上面的论述，两者的关系式如下：

$$M^*M = V\Sigma^*U^*U\Sigma V^* = V(\Sigma^*\Sigma)V^*$$

$$MM^* = U\Sigma V^*V\Sigma^*U^* = U(\Sigma\Sigma^*)U^*$$

关系式的右边描述了关系式左边的特征值分解。于是：

- V 的列向量（右奇异向量）是 M^*M 的特征向量。
- U 的列向量（左奇异向量）是 MM^* 的特征向量。
- Σ 的非零對角元（非零奇异值）是 M^*M 或者 MM^* 的非零特征值的平方根。

特殊情况下，当 M 是一个正规矩阵（因而必須是方阵）根据谱定理， M 可以被一组特征向量酉对角化，所以它可以表为：

$$M = UDU^*$$

其中 U 为一个酉矩阵， D 为一个对角阵。如果 M 是半正定的， $M = UDU^*$ 的分解也是一个奇异值分解。

然而，一般矩陣的特征分解跟奇异值分解不同。特征分解如下：

$$M = UDU^{-1}$$

其中 U 是不需要是酉的， D 也不需要是半正定的。而奇异值分解如下：

$$M = U\Sigma V^*$$

其中 Σ 是对角半正定矩阵， U 和 V 是酉矩阵，两者除了通过矩阵 M 没有必然的联系。

几何意义

因为 U 和 V 都是酉的，我们知道 U 的列向量 u_1, \dots, u_m 组成了 K^m 空间的一组标准正交基。同样， V 的列向量 v_1, \dots, v_n 也组成了 K^n 空间的一组标准正交基（根据向量空间的标准点积法则）。

矩阵 M 代表从 K^n 到 K^m 的一个线性映射 $\mathcal{T}: x \rightarrow Mx$ 。通过这些标准正交基，这个变换可以用很简单的方式进行描述： $\mathcal{T}(v_i) = \sigma_i u_i, i = 1, \dots, \min(m, n)$ ，其中 σ_i 是 Σ 中的第 i 个对角元。当 $i > \min(m, n)$ 时， $\mathcal{T}(v_i) = 0$ 。

这样，SVD分解的几何意义就可以做如下的归纳：对于每一个线性映射 $\mathcal{T}: K^n \rightarrow K^m$ ， \mathcal{T} 的奇异值分解在原空间与像空间中分别找到一组标准正交基，使得 \mathcal{T} 把 K^n 的第 i 个基向量映射为 K^m 的第 i 个基向量的非负倍数，并将 K^n 中余下的基向量映射为零向量。换句话说，线性变换 \mathcal{T} 在这两组选定的基上的矩阵表示为所有对角元均为非负数的对角矩阵。

应用

求伪逆

奇异值分解可以被用来计算矩阵的伪逆。若矩阵 M 的奇异值分解为 $M = U\Sigma V^*$ ，那么 M 的伪逆为

$$M^+ = V\Sigma^+ U^*,$$

其中 Σ^+ 是 Σ 的伪逆，是将 Σ 主对角线上每个非零元素都求倒数之后再转置得到的。求伪逆通常可以用来求解最小二乘法问题。

列空间、零空间和秩

奇异值分解的另一个应用是给出矩阵的列空间、零空间和秩的表示。对角矩阵 Σ 的非零对角元素的个数对应于矩阵 M 的秩。与零奇异值对应的右奇异向量生成矩阵 M 的零空间，与非零奇异值对应的左奇异向量则生成矩阵 M 的列空间。在线性代数数值计算中奇异值分解一般用于确定矩阵的有效秩，这是因为，由于舍入误差，秩亏矩阵的零奇异值可能会表现为很接近零的非零值。

矩阵近似值

奇异值分解在统计中的主要应用为主成分分析（PCA）。数据集的特征值（在SVD中用奇异值表征）按照重要性排列，降维的过程就是舍弃不重要的特征向量的过程，而剩下的特征向量张成空间为降维后的空间。

幾種程式語言中計算SVD的函式範例

- matlab :

```
[b c d]=svd(x)
```

- OpenCV:

```
void cvSVD( CvArr* A, CvArr* W, CvArr* U=NULL, CvArr* V=NULL, int flags=0 )
```

- Python（使用SciPy库）

```
U,s,Vh = scipy.linalg.svd(A)
```

历史

参见

外部链接

- [LAPACK users manual](#) gives details of subroutines to calculate the SVD (see also [\[1\]](#)).
- [Applications of SVD](#) on PC Hansen's web site.
- [Introduction to the Singular Value Decomposition](#) by Todd Will of the University of Wisconsin-La Crosse.
- [Los Alamos group's book chapter](#) has helpful gene data analysis examples.
- MIT Lecture series by Gilbert Strang. See Lecture #29 on the SVD.
- [Java SVD library routine](#).
- [Java applet](#) demonstrating the SVD.
- [Java script](#) demonstrating the SVD more extensively paste your data from a spreadsheet.
- [Chapter from "Numerical Recipes in C"](#) gives more information about implementation and applications of SVD.
- [Online Matrix Calculator](#) Performs singular value decomposition of matrices.

参考文献

- Demmel, J. and Kahan, W (1990). Computing Small Singular Values of Bidiagonal Matrices With Guaranteed High Relative Accuracy *SIAM J. Sci. Statist. Comput*, **11** (5), 873-912.
- Golub, G. H. and Van Loan, C. F. (1996). "Matrix Computations". 3rd ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore. ISBN 0-8018-5414-8
- Halldor, Bjornsson and Venegas, Silvia A. (1997). "[A manual for EOF and SVD analyses of climate data](#)" McGill University, CCGCR Report No. 97-1, Montréal, Québec, 52pp.
- Hansen, P. C. (1987). The truncated SVD as a method for regularization *BIT*, **27**, 534-553.
- Horn, Roger A. and Johnson, Charles R (1985). "Matrix Analysis". Section 7.3. Cambridge University Press. ISBN 0-521-38632-2
- Horn, Roger A. and Johnson, Charles R (1991). [Topics in Matrix Analysis](#), Chapter 3. Cambridge University Press. ISBN 0-521-46713-6
- Strang G (1998). "Introduction to Linear Algebra". Section 6.7. 3rd ed., Wellesley-Cambridge Press. ISBN 0-9614088-5-5

取自“<https://zh.wikipedia.org/w/index.php?title=奇异值分解&oldid=47689143>”

本页面最后修订于2018年1月6日 (星期六) 09:04。

本站的全部文字在知识共享 署名-相同方式共享 3.0协议之条款下提供，附加条款亦可能应用。（请参阅[使用条款](#)）
Wikipedia®和维基百科标志是维基媒体基金会的注册商标；维基™是维基媒体基金会的商标。
维基媒体基金会是在美国佛罗里达州登记的501(c)(3)免税、非营利、慈善机构。