

Lecture 3 Singular Value Decomposition(SVD) (奇异值分解)

matrix decomposition

- LU,QR,Cholsky...
- SVD is good for "big data"
- extract most important features

考虑 $n \times m$ 的矩阵 $X = (...; x_1, x_2, ...x_m; ...)$ ，每一列都是一个高维向量，可以理解为有 m 组“样本”。

若 $n \gg m$ ，理解为测量量数远大于样本数；

或者 $m \gg n$ ，理解为大规模调研 (survey)，股票预测 (stock market) 等；

这些矩阵的形状是“细长”型的，因此需要新的方法来作为分解工具。

Start With an Example

motivation

在前面我们讨论过， Ax 实际上是对向量作两种变换：

- 旋转变换 (rotation)： $A = (\cos\theta, -\sin\theta; \sin\theta, \cos\theta)$
- 伸缩变换 (stretching)： $A = (\alpha, 0; 0, \alpha)$

在二维情况下，假设两个标准正交基，作变换以后仍正交，此时由圆变为（椭）圆。

扩展到 n 维情况是：有 n 个标准正交基，经过变换之后仍正交，变为超椭圆 (hyper-ellipse)。

推导过程

这样，我们就能写出变换式： $Av = \sigma u$ ，其中 u, v 可以不同

写成向量形式：

$$\text{即 } AV = \hat{U}\hat{\Sigma}$$

其中 V 为正交矩阵 (unitary transformation)，具有性质： $V^T V = V V^T = I$
 $\hat{\Sigma}$ 为对角阵，负责对向量作伸缩变换，且 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$

\hat{U} 是结果向量构成的矩阵，向量之间正交，具有性质： $\hat{U}^T \hat{U} = I_{n \times n}$

因此，当 $m > n$ 时，得到 \hat{U} 的公式称为Reduced SVD。

由于我们对 \hat{U} 的形式不太满意，于是将 V 放到右边，有
 $A = \hat{U} \hat{\Sigma} V^T$ 。

运用施密特正交化原理得到完整正交基，将 \hat{U} 变为 $m \times m$ 的方阵，对 $\hat{\Sigma}$ 下方全部补0，得正式的SVD
 $A = U \Sigma V^T$

- 注意当 $m < n$ 也成立

SVD

Definition

Every matrix $A \in C^{m \times n}$ has a singular value decomposition.

对于矩阵没有要求，适用范围更广。

- singular values σ_j are uniquely determined;
- if A is square and the σ_j distinct, the singular vectors u_j and v_j are uniquely determined up to complex signs.

在上面的叙述中认为 u, v 扩大多少倍都认为是同一向量。该叙述确定了唯一条件。

- Σ : $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\max(m,n)} \geq 0$
- $U^T U = U U^T = I_{m \times m}, V^T V = V V^T = I_{n \times n}$

在matlab中，可以用svd函数实现奇异值分解：

```
svd(A);  
[U,S,V]=svd(A);
```

SVD与eigen-decomposition的关系

$$A^T A = V \Sigma_v^2 V^T, A A^T = U \Sigma_u^2 U^T, \text{ 其中 } \Sigma_v = \Sigma^T \Sigma, \Sigma_u = \Sigma \Sigma^T$$

等号右边的形式就是对角化分解。这就是说，我们可以通过对 $A A^T$ 或 $A^T A$ 作对角分解得出奇异值分解的结果。其中中间的对角矩阵的元素就是奇异值分解中对角矩阵元素的平方。

性质

- 如果A的秩是r，那么有且只有r个非零的singular values

proof:

$$\text{rank}(A) = \text{rank}(U\Sigma V^T) = \text{rank}(\Sigma) = r$$

Optional

- $|A| = \prod_{j=1}^{\min m, n} \sigma_j$

proof:

行列式展开成奇异值分解形式即可。