《数值计算方法》课程

矩阵的特征值和奇异值

QR分解

胡建芳

（研究方向：计算机视觉）

http://sdcs.sysu.edu.cn/content/5143

计算机学院

课程回顾

■ 幂迭代法：

幂法：

迭代收敛于主特征向量和主特征值

(1) 任取一个非零向量 v_0，要求满足 $(x_1,v_0)\neq 0$

(2) 对 $k=1, 2, \ldots$，直到收敛，计算

$$u_k=\frac{v_k}{\|v_k\|_\infty},\quad v_{k+1}=Au_k$$

反幂法：

用于计算绝对值最小的特征值，及其对应向量

(1) 任取一个非零向量 v_0，要求满足 $(x_1,v_0)\neq 0$

(2) 对 $k=1, 2, \ldots$，直到收敛，计算

$$u_k=\frac{v_k}{\|v_k\|_\infty},\quad v_{k+1}=A^{-1}u_k$$

对应的收敛性?

课程回顾

- ## 奇异值分解定理：

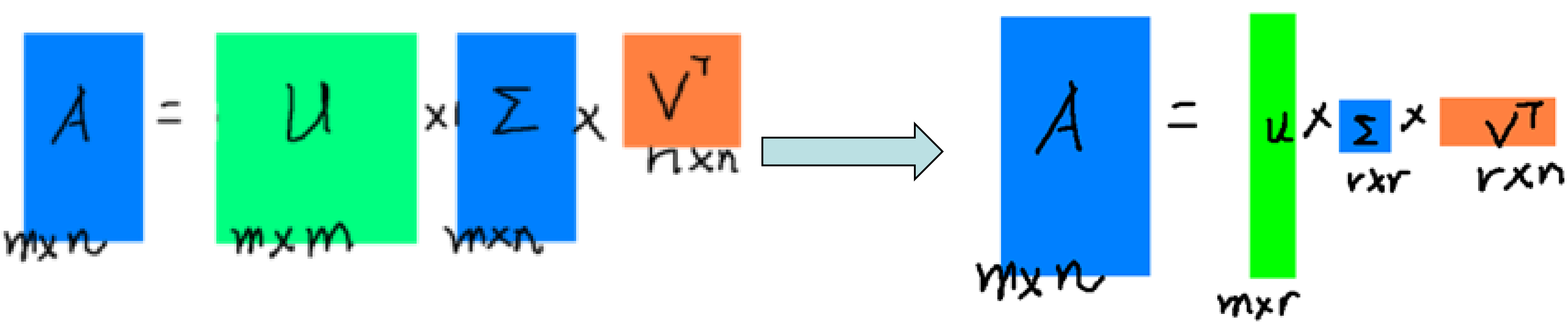
定理 设$A \in R^{m\times n}$，秩$(A)=r$,则存在m阶正交阵U和n阶正交阵V，使得

$$U^T AV = \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

其中$\Sigma_r = diag(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_r)$,且$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$

称$A = U\Sigma V^T = U\begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}V^T$为矩阵$A$的奇异值分解,

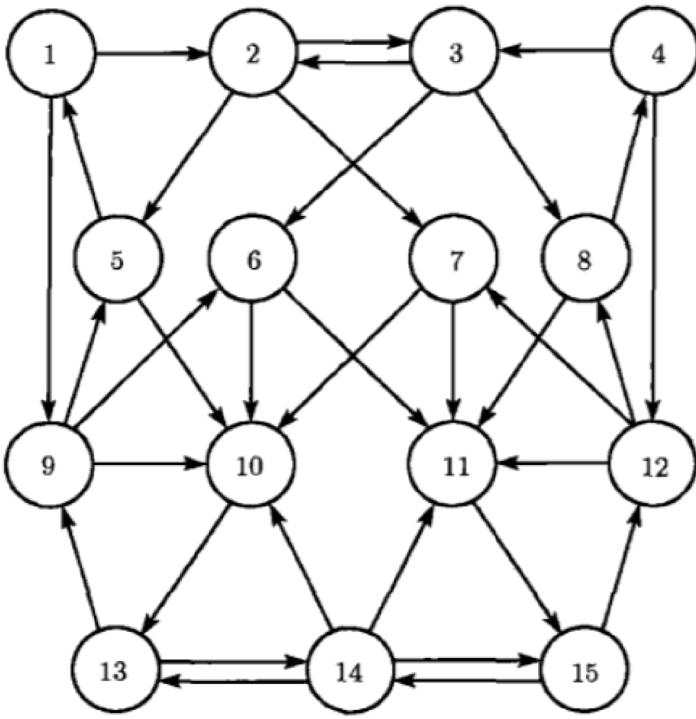
$\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$为矩阵$A$的奇异值矩阵。



特征值特征向量的意义

- **举例：Google搜索排序**

  假设有15个页面，页面之间的链接关系如图。



邻接矩阵

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

行和、列和的意义?

定义：网络浏览者，目前停留在第 i 页的概率为 p_i，
以固定概率q随机浏览一页，或者以概率1-q 单击第 i个页面的超链接

特征值特征向量的意义

- **Google搜索排序**

上网者从第 i 页跳到第j页的概率为：

$q/n+(1-q)A_{ij}/n_i$, n_i 是A的第i行所有元素和

则，上网者在网页j的概率为：

$$p_j = \sum_i \left[\frac{qp_i}{n} + (1-q)\frac{p_i}{n_i}A_{ij} \right),$$

$$\Downarrow$$

$$p = Gp,$$

求特征向量问题，用幂法迭代

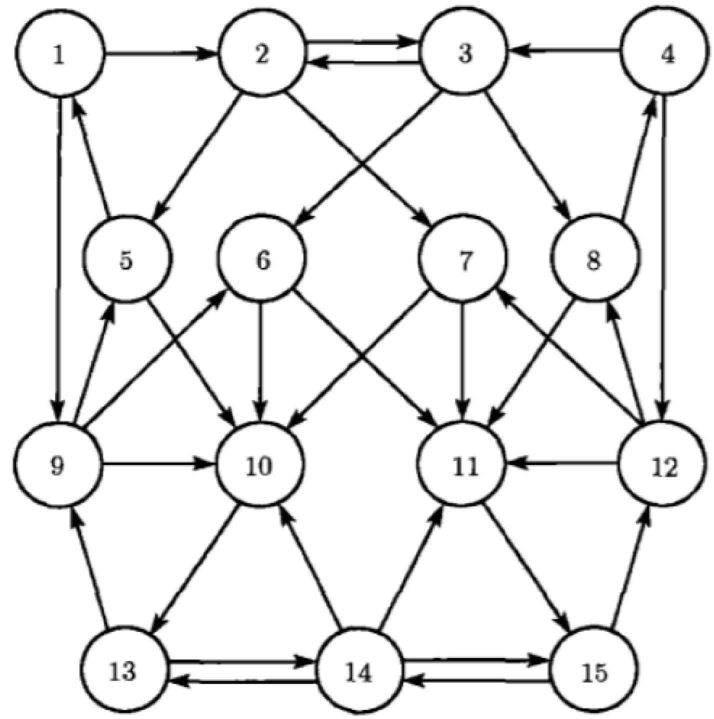
Google 公司的核心技术，由其创始人**Brin**和**Page**发表于**1998**年。

类似地，可以用于**网页推荐**。

特征值特征向量的意义

Google搜索排序

$$\boldsymbol{p} = G\boldsymbol{p}, \xrightarrow{q=0.15} \boldsymbol{p} = \begin{bmatrix} 0.026\,8 \\ 0.029\,9 \\ 0.029\,9 \\ 0.026\,8 \\ 0.039\,6 \\ 0.039\,6 \\ 0.039\,6 \\ 0.039\,6 \\ 0.074\,6 \\ 0.106\,3 \\ 0.106\,3 \\ 0.074\,6 \\ 0.125\,1 \\ 0.116\,2 \\ 0.125\,1 \end{bmatrix}$$



结论：

A. 13，15页面等级最高，其次页面14，10，11

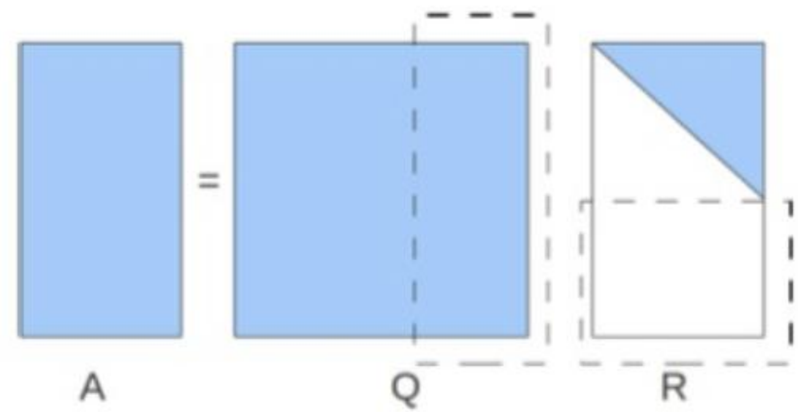
B. 被高流量的网页加入链接，可以提高网页等级

矩阵QR分解

QR分解定义

一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$ 可以被分解成 $A = QR$ ，其中:

- $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 是正交矩阵
- $R \equiv \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}$
- $\hat{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是上三角矩阵



QR分解

正交矩阵的性质

- $Q^T Q = QQ^T = I$
- 左乘一个正交矩阵对欧式范数的结果不影响（在下面证明eq.2的时候会用到）

$$||Qv||_2^2 = v^T Q^T Qv = v^T v = ||v||_2^2$$

QR分解

QR分解有什么用?

1. 最小二乘，解过拟合方程组

$Ax = b,\ A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 的问题可以分成3类:

- 情况1：A是方阵，m=n
- 情况2：A是over-determined的，m>n
- 情况3：A是under-determined的，m<n

2. 求解矩阵特征值

QR分解

QR分解怎么做?

GSO构建正交矩阵 $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 的方法是从A矩阵的n个列（ $A_{:,j} \in \mathbb{R}^{m\times 1}$ ）中构建互相正交的基，先选定 $A_{:,0}$ 为第一个基，然后把第二列 $A_{:,1}$ 减去平行于 $A_{:,0}$ 的部分，剩下的垂直于 $A_{:,0}$ 的部分作为下一个基，以此类推，直到生成了n个基。

$$
\begin{aligned}
A_{:,0} &= r_{00}\, q_0 \\
A_{:,1} &= r_{0,1}\, q_0 + r_{1,1}\, q_1 \\
&\vdots \\
A_{:,n-1} &= r_{0,n-1}\, q_0 + r_{1,n-1}\, q_1 + \cdots + r_{n-1,n-1}\, q_{n-1} \\
A &= \hat{Q}\hat{R}
\end{aligned}
$$

$$
[\, A_{:,0} | A_{:,1} | \ldots | A_{:,n-1} \,] = [\, q_0 | q_1 | \ldots | q_{n-1} \,]
\begin{bmatrix}
r_{0,0} & r_{0,1} & \cdots & r_{0,n-1} \\
 & r_{1,1} & \cdots & r_{1,n-1} \\
 & & \ddots & \vdots \\
 & & & r_{n-1,n-1}
\end{bmatrix}
$$

QR分解

- **QR分解唯一吗?**

任意一个满秩实矩阵A，都可以唯一地分解A=QR，其中Q为正交矩阵，R是具有正对角元的上三角矩阵。

存在性由Schmidt正交化方法保证

再证唯一性　如果$A=QR=Q_1R_1$,则

由此得　$Q=Q_1R_1R^{-1}=Q_1D$

式中$D=R_1R^{-1}$仍为具有正对角元的上三角矩阵。由于

$$I=Q^TQ=(Q_1D)^T(Q_1D)=D^TD$$

即D为正交矩阵，因此D为单位矩阵（正规上三角为对角阵）

故　$Q=Q_1D=Q_1,\ R_1=DR=R$

QR分解

QR分解怎么做?

for $j = 1 : n$ do
    $v_j = a_{(:,j)}$
    for $i = 1 : j-1$ do
        $r_{ij} = q_i^T a_{(:,j)}$
        $v_j = v_j - r_{ij} q_i$
    end for
    $r_{jj} = \|v_j\|_2$
    $q_j = v_j / r_{jj}$
end for

改进前

for $i = 1 : n$ do
    $v_i = a_{(:,i)}$
end for
for $i = 1 : n$ do
    $r_{ii} = \|v_i\|_2$
    $q_i = v_i / r_{ii}$
    for $j = i+1 : n$ do
        $r_{ij} = q_i^T v_j$
        $v_j = v_j - r_{ij} q_i$
    end for
end for

改进版

QR分解

- **QR分解举例**

例 求矩阵A的QR分解 $A=\begin{pmatrix}1&2&2\\1&0&2\\0&1&1\end{pmatrix}$

解

记 $x_1=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}, x_2=\begin{pmatrix}2\\0\\1\end{pmatrix}, x_3=\begin{pmatrix}2\\2\\1\end{pmatrix}$, 则

将 x_1, x_2, x_3 **正交化**

$$\begin{cases} y_1 = x_1 \\ y_2 = x_2 - \frac{(x_2, y_1)}{(y_1, y_1)} y_1 = x_2 - y_1 = (1,-1,1)^T \\ y_3 = x_3 - \frac{(x_3, y_1)}{(y_1, y_1)} y_1 - \frac{(x_3, y_2)}{(y_2, y_2)} y_2 \\ \qquad = x_3 - 2y_1 - \frac{1}{3} y_2 = \frac{1}{3}(-1,1,2)^T \end{cases}$$

单位化 $$\begin{cases} e_1 = \frac{y_1}{|y_1|} = \frac{\sqrt{2}}{2}(1,1,0)^T \\ e_2 = \frac{y_2}{|y_2|} = \frac{\sqrt{3}}{3}(1,-1,1)^T \\ e_3 = \frac{y_3}{|y_3|} = \frac{\sqrt{6}}{6}(-1,1,2)^T \end{cases}$$

QR分解

- **QR分解举例**

整理得

$$\begin{cases} x_1 = \sqrt{2}e_1 \\ x_2 = \sqrt{2}e_1 + \sqrt{3}e_2 \\ x_3 = 2\sqrt{2}e_1 + \frac{\sqrt{3}}{3}e_2 + \frac{\sqrt{6}}{3}e_3 \end{cases}$$

令

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{6} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{3} \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} \end{pmatrix}$$

QR分解

QR分解举例

例 4.13 求 $A=\begin{bmatrix}1 & -4\\ 2 & 3\\ 2 & 2\end{bmatrix}$ 的 QR 分解.

在例 4.12 中，我们求解正交单位向量 $q_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix}$, $q_2=\begin{bmatrix}-\frac{14}{15}\\ \frac{1}{3}\\ \frac{2}{15}\end{bmatrix}$. 加上第 3 个向量 $v_3=\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$ 导出

$$y_3=v_3-q_1q_1^{\mathrm{T}}v_3-q_2q_2^{\mathrm{T}}v_3=\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}\frac{1}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix}\frac{1}{3}-\begin{bmatrix}-\frac{14}{15}\\ \frac{1}{3}\\ \frac{2}{15}\end{bmatrix}\left(-\frac{14}{15}\right)$$

$$=\frac{2}{225}\begin{bmatrix}2\\ 10\\ -11\end{bmatrix},\quad q_3=y_3/\|y_3\|=\begin{bmatrix}\frac{2}{15}\\ \frac{10}{15}\\ -\frac{11}{15}\end{bmatrix}.$$

QR分解

QR分解举例

例 4.13 求 $A=\begin{bmatrix}1 & -4\\ 2 & 3\\ 2 & 2\end{bmatrix}$ 的 QR 分解.

设 $\boldsymbol{y}_1=\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix}$. 于是 $r_{11}=\|\boldsymbol{y}_1\|_2=\sqrt{1^2+2^2+2^2}=3$, 并且第一个单位向量是

$$\boldsymbol{q}_1=\frac{\boldsymbol{v}_1}{\|\boldsymbol{v}_1\|_2}=\begin{bmatrix}\frac{1}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix}.$$

$$\boldsymbol{y}_2=\boldsymbol{v}_2-\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}-4\\3\\2\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}\frac{1}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix}\times 2=\begin{bmatrix}-\frac{14}{3}\\ \frac{5}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{q}_2=\frac{\boldsymbol{y}_2}{\|\boldsymbol{y}_2\|_2}=\frac{1}{5}\begin{bmatrix}-\frac{14}{3}\\ \frac{5}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{14}{15}\\ \frac{1}{3}\\ \frac{2}{15}\end{bmatrix}.$$

QR分解

QR分解举例

个向量 $\boldsymbol{v}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ 导出

$$\boldsymbol{y}_3 = \boldsymbol{v}_3 - \boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_3 - \boldsymbol{q}_2\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} \frac{1}{3} - \begin{bmatrix} -\frac{14}{15} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{2}{15} \end{bmatrix} \left(-\frac{14}{15}\right)$$

$$= \frac{2}{225} \begin{bmatrix} 2 \\ 10 \\ -11 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{q}_3 = \boldsymbol{y}_3 / \|\boldsymbol{y}_3\| = \begin{bmatrix} \frac{2}{15} \\ \frac{10}{15} \\ -\frac{11}{15} \end{bmatrix}.$$

把各部分放到一起, 我们就得到 $\boldsymbol{QR}$ 分解

$$\begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{QR} = \frac{1}{15} \begin{bmatrix} 5 & -14 & 2 \\ 10 & 5 & 10 \\ 10 & 2 & -11 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 5 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

QR分解

- **作业：**

  求下列矩阵的QR分解

$$
\begin{bmatrix}
4 & 2 & 3 & 0 \\
-2 & 3 & -1 & 1 \\
1 & 3 & -4 & 2 \\
1 & 0 & 1 & -1 \\
3 & 1 & 3 & -2
\end{bmatrix}
$$

矩阵特征值

THE END