

奇异值分解 SVD算法的原理推导

假设有 $m \times n$ 的非方阵矩阵 A , 对其进行矩阵分解的表达式为:

$$A = U \Lambda V^T$$

其中 U 为 $m \times m$ 矩阵, Λ 为 $m \times n$ 对角矩阵, V 为 $n \times n$ 矩阵。 U 和 V 均为酉矩阵,

$$U^T U = E$$

$$V^T V = E$$

在方程中我们通过求解齐次方程来计算矩阵特征值和特征向量。

由于矩阵 A 是非方阵矩阵, 因此我们对矩阵 A 的转置矩阵 A^T 与矩阵 A 做矩阵乘法运算, 可得 $m \times m$ 矩阵 $A^T A$, 然后对该矩阵求解。

$$(A^T A) u_i = \lambda_i u_i$$

由上式可得方程 $A^T A$ 的 m 个特征值和特征向量, 该 m 个特征向量即可构成特征矩阵 U 。我们将这 m 个特征向量称为矩阵 A 的左奇异向量, 特征矩阵 U 也称为 A 的左奇异矩阵。

同理我们又对矩阵 A 与其转置矩阵 A^T 做矩阵乘法运算, 同样可得 $n \times n$ 矩阵 AA^T , 然后对该矩阵求特征值和特征向量。

$$(AA^T) v_i = \lambda_i v_i$$

由上式可求得方程 AA^T 的 n 个特征和特征向量, 我们把这 n 个特征向量称为矩阵 A 的右奇异向量, 特征矩阵 V 也称矩阵 A 的右奇异矩阵。

接下来求奇异值矩阵 Λ :

$$A = U \Lambda V^T$$

$$AV = U \Lambda V^T V$$

$$AV = U \Lambda$$

$$A v_i = \sigma_i u_i$$

$$\sigma_i = A v_i / u_i$$

按照上述推导,我们可计算奇异值而得到奇异值矩阵。实际上,通过推导特征值与奇异值之间的关系,也可由特征值来计算奇异值。

$$A = U \Lambda V^T$$

$$A^T = V \Lambda U^T$$

$$A^T A = V \Lambda U^T U \Lambda V^T = V \Lambda^2 V^T$$

由上式可知,特征值矩阵为奇异值矩阵的平方,即特征值是奇异值的平方。