奇异值分解
Singular Value Decomposition

西安交通大学管理学院
信息管理与电子商务系
智能决策与机器学习研究中心
刘佳鹏

思考下列问题

设 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, \boldsymbol{x}=(\sqrt{2},0)^{\mathrm{T}}$, 得到$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=(2\sqrt{2},-\sqrt{2})^{\mathrm{T}}$。如何理解该矩阵乘法呢?

矩阵乘法的理解

- 矩阵乘法的本质是线性变换！常见的简单变换包括
- （1）**拉伸变换，**包括：
  水平拉伸：
$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} k & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$
  例如
$$\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$
  垂直拉伸：
$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{bmatrix}$$
  例如
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

矩阵乘法的理解

- （2）**翻转变换，亦称反射变换，包括：**
  关于X轴翻转：
  $$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$
  例如
  $$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$$
  关于Y轴翻转：
  $$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$
  例如
  $$\begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1\\ 1\end{bmatrix}$$

矩阵乘法的理解

- 关于Y=X翻转：

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

例如

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

关于Y=-X翻转：

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

例如

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

矩阵乘法的理解

- 关于原点翻转:

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

例如

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

矩阵乘法的理解

- （3）**旋转变换：**
  关于原点旋转 θ°（$\theta > 0$逆时针旋转，$\theta < 0$顺时针旋转）：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

  例如，顺时针旋转90°，

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{有} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

矩阵乘法的理解

- （4）**投影变换，**包括
  向X轴投影：
  $$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$$
  例如
  $$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$$
  向Y轴投影：
  $$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$
  例如
  $$\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$$

回到开篇的问题

$$\boldsymbol{Ax} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

- 如何理解$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$对应的线性变换？
- $\boldsymbol{A}$是一系列简单线性变换的组合！

回到开篇的问题

- 如何找出$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$背后对应的一系列简单线性变换呢？
- 这需要用到线性代数里的特征值和对角化等概念，在使用这些概念之前，我们先给出$\boldsymbol{A}$分解得到的结果

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{D}\boldsymbol{P}^{-1}$$

其中 $\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \boldsymbol{P}^{-1} = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$

回到开篇的问题

- 矩阵$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$和$\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$可以进一步分解为

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

分别表示“关于Y轴翻转”和“逆时针旋转45度”这两种简单线性变换的复合操作

$$\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

分别表示“顺时针旋转45度”和“关于Y轴翻转”这两种简单线性变换的复合操作

回到开篇的问题

- 因此，$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$可以分解为五个简单线性变换的复合操作

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

回到开篇的问题

- 因此线性变换 $\boldsymbol{A}$ 施加在点 $\boldsymbol{x}=(\sqrt{2},0)^{\mathrm{T}}$ 的变换可以分解为如下步骤:
- （1）$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{x}=(-1,1)^{\mathrm{T}}$：将点 $\boldsymbol{x}$ 关于Y轴翻转得到 $(-\sqrt{2},0)^{\mathrm{T}}$，然后再顺时针旋转 45 度得到$(-1,1)^{\mathrm{T}}$；
- （2）$\boldsymbol{DP}^{-1}\boldsymbol{x}=(-3,1)^{\mathrm{T}}$：将步骤（1）中得到的点 $(-1,1)^{\mathrm{T}}$ 进行水平拉伸得到 $(-3,1)^{\mathrm{T}}$；
- （3）$\boldsymbol{PDP}^{-1}\boldsymbol{x}=(2\sqrt{2},-\sqrt{2})^{\mathrm{T}}$：将步骤（2）中得到的点 $(-3,1)^{\mathrm{T}}$逆时针旋转 45 度得到$(-2\sqrt{2},-\sqrt{2})^{\mathrm{T}}$，然后再关于Y轴翻转得到$(2\sqrt{2},-\sqrt{2})^{\mathrm{T}}$。
- 注：上述变换中的步骤（1）和（3）只是一些翻转、旋转变换，没有改变向量的长度，而步骤（2）中的变换改变了向量的长度。

回到开篇的问题

- 通过上述例子，我们可以看出，如果对一个矩阵$\boldsymbol{A}$可以实施上述分解，那我们就能直观理解其背后包含的简单变换。
- 那么现在问题就变成了：（1）所有的矩阵$\boldsymbol{A}$都可以进行这样的分解吗？（2）如果矩阵$\boldsymbol{A}$可以分解，那么该如何进行实施这样的分解呢？
- 要回答上述问题，需要用到我们在线性代数课程中学过的矩阵对角化的知识。

矩阵对角化

- 设 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$都是$n$阶方阵，如果存在一个$n$阶可逆方阵$\boldsymbol{P}$，使得

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{B},$$

  则称$\boldsymbol{A}$相似于$\boldsymbol{B}$或$\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{B}$相似，记作$A \sim B$，并称由$\boldsymbol{A}$到$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$的变换为一个相似变换。如果$\boldsymbol{A}$与一个对角矩阵相似，则称$\boldsymbol{A}$可相似对角化，简称为$\boldsymbol{A}$可对角化。
- 因为$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{B}$，所以$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}^{-1}$。
  - 利用该分解可以简化计算$\boldsymbol{A}^n$：$\boldsymbol{A}^n = \boldsymbol{P}\boldsymbol{B}^n\boldsymbol{P}^{-1}$。

矩阵对角化

- 问题：所有的矩阵都可以对角化吗？
- 答：不是的，要求矩阵必须是方阵，同时要满足以下充要条件。
- （矩阵可对角化的充要条件1） n阶方阵$\boldsymbol{A}$可对角化的充要条件是$\boldsymbol{A}$有n个线性无关的特征向量。
- （矩阵可对角化的充要条件2） n阶方阵$\boldsymbol{A}$可对角化的充要条件是$\boldsymbol{A}$的每个特征值的几何重数都等于它的代数重数。

矩阵对角化

- 虽然不是所有的矩阵都可以对角化，但有一类矩阵一定可以对角化，这就是实对称矩阵。
- 性质1：实对称矩阵的特征值都是实数。
- 性质2：设λ_1, λ_2是实对称矩阵$\boldsymbol{A}$的相异特征值，$\boldsymbol{x}_1$和$\boldsymbol{x}_2$分别是与λ_1和λ_2对应的特征向量，则$\boldsymbol{x}_1$与$\boldsymbol{x}_2$正交。
- 性质3：设λ为实对称矩阵$\boldsymbol{A}$的任一特征值，则λ的几何重数与其代数重数必相等。

矩阵对角化

- 根据上述性质，我们可以用单位正交矩阵使实对称矩阵$\boldsymbol{A}$对角化，即求单位正交矩阵$\boldsymbol{P}$，使$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$成为对角矩阵。
- 为此，只需对n阶实对称矩阵$\boldsymbol{A}$的每个特征值λ_i取方程组$(\lambda_i \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = 0$的正交化单位化的基础解系（即特征子空间 $\boldsymbol{V}_{\lambda_i}$ 的一个标准正交基），此即属于特征值λ_i的正交化单位化的特征向量。
- **将所有这样的特征向量放在一起，由性质3可知，此向量组共有n个向量，而且它们是两两正交的。**
- 事实上，若其中的两个向量分别属于$\boldsymbol{A}$的两个不同待征值，则由性质2可知它们是正交的；若其中的两个向量属于$\boldsymbol{A}$的同一特征值，则由前面的取法可知它们也是正交的。

矩阵对角化

- 由上可知，对实对称矩阵$\boldsymbol{A}$，求正交矩阵$\boldsymbol{P}$,使 $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$成对角矩阵的步骤是:
- **步骤1**：求出$\boldsymbol{A}$的全部特征值$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$;
- **步骤2**：对$\boldsymbol{A}$的每个特征值λ_i，求出方程组

$$(\lambda_i \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = 0$$

的一个基础解系（即特征子空间$\boldsymbol{V}_{\lambda_i}$的一个基）;

矩阵对角化

- **步骤3：**对每个特征值λ_i，将特征子空间$\boldsymbol{V}_{\lambda_i}$的基中的向量先正交化，再单位化（如果$\lambda_i$为单特征值或$\boldsymbol{V}_{\lambda_i}$的基中的向量已是正交向量组，则只需单位化），从而得到$\boldsymbol{A}$的n个标准正交的特征向量$\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n$；
- **步骤4：**令矩阵$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \cdots & \boldsymbol{e}_n \end{bmatrix}$，则$\boldsymbol{P}$为正交矩阵，且有

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n),$$

其中$\boldsymbol{P}$的第j列$\boldsymbol{e}_j$是属于特征值λ_j的特征向量，$j = 1, 2, \cdots, n$。

矩阵对角化

- **例1**：设实对称矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -2 & 0 \\ -2 & 1 & -2 \\ 0 & -2 & 0 \end{bmatrix}$$

求一个正交矩阵$\boldsymbol{P}$，使$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$成对角矩阵。

矩阵对角化

- **例2：** 设实对称矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 2 & 2 & -2 \\ 2 & 5 & -4 \\ -2 & -4 & 5 \end{bmatrix}$$

求一个正交矩阵P，使$P^{-1}AP$成对角矩阵。

矩阵对角化

- **酉矩阵**：对于实对称矩阵$\boldsymbol{A}$，如果我们采用n个标准正交的特征向量构成矩阵$\boldsymbol{P}$，必然有$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$，例如

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{3}\\ 0 & \frac{5}{3\sqrt{5}} & -\frac{2}{3}\end{bmatrix}.$$

  又因为$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$，所以有$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{P}^{-1}$。此时，我们称$\boldsymbol{P}$为**酉矩阵**(Unitary Matrix)。
  - $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$
- 我们可以将矩阵$\boldsymbol{P}$视为矩阵$\boldsymbol{A}$对应的线性变化中出现的新坐标系，因为$\boldsymbol{P}$是由标准正交基构成的。

奇异值分解

- 通过回顾矩阵对角化的知识我们知道，不是所有的矩阵$\boldsymbol{A}$都可以对角化，但一定可以进行分解！
- 奇异值分解（singular value decomposition, SVD）就是一种矩阵因子分解方法，它是方阵对角化的推广。

奇异值分解

- （**奇异值分解**）矩阵的奇异值分解是指，将一个非零的$m \times n$实矩阵$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$表示为以下三个实矩阵乘积形式的运算：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U} \Sigma \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}, \tag{1}$$

其中$\boldsymbol{U}$是m阶正交矩阵(orthogonal matrix)，$\boldsymbol{V}$是n阶正交矩阵，Σ是由降序排列的非负的对角线元素组成的$m \times n$矩形对角矩阵(rectangular diagonal matrix)，满足

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}, \\
&\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}, \\
&\boldsymbol{\Sigma} = \operatorname{diag}\left(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_p\right), \\
&\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_p \geqslant 0, \\
&p = \min(m, n).
\end{aligned}$$

奇异值分解

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}, \\
&\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}, \\
&\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}\left(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_p\right), \\
&\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_p \geqslant 0, \\
&p = \min(m, n).
\end{aligned}$$

- $\boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$称为矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值分解（singular value decomposition, SVD）
- σ_i称为矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值（singular value）
- $\boldsymbol{U}$的列向量称为左奇异向量（left singular vector）
- $\boldsymbol{V}$的列向量称为右奇异向量（right singular vector）

奇异值分解

- **例3：** 给定一个5×4矩阵$\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&4\\0&3&0&0\\0&0&0&0\\2&0&0&0\end{bmatrix}$$

它的奇异值分解结果为

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}0&0&\sqrt{0.2}&0&\sqrt{0.8}\\1&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&\sqrt{0.8}&0&-\sqrt{0.2}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}4&0&0&0\\0&3&0&0\\0&0&\sqrt{5}&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}0&0&0&1\\0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&1&0\end{bmatrix}$$

矩阵Σ是对角矩阵，对角线外的元素都是0，对角线上的元素非负，按降序排列。矩阵$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$是正交矩阵，它们与各自的转置矩阵相乘是单位矩阵，即$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_5$，$\quad\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_4$。

奇异值分解

- 矩阵的奇异值分解不是唯一的。在此例中如果选择$\boldsymbol{U}$为

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & \sqrt{0.2} & \sqrt{0.4} & -\sqrt{0.4} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{0.5} & \sqrt{0.5} \\ 0 & 0 & \sqrt{0.8} & -\sqrt{0.1} & \sqrt{0.1} \end{bmatrix}$$

而Σ与$\boldsymbol{V}$不变，那么$\boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$也是$\boldsymbol{A}$的一个奇异值分解。

奇异值分解的性质

- （1）如果矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值分解为$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，则以下关系成立：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)=\boldsymbol{V}\left(\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\right)\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{U}\left(\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$$

$\boldsymbol{V}$的列向量是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$的特征向量，$\boldsymbol{U}$的列向量是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$的特征向量，$\boldsymbol{\Sigma}$中的奇异值是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$的特征值的平方根

奇异值分解的性质

- （2）对于$m > n$这种情况：
  由$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$易知

  $$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}\Sigma$$

  比较这一等式两端的第j列，得到

  $$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = \sigma_j \boldsymbol{u}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, n$$

  这是矩阵$\boldsymbol{A}$的右奇异向量和奇异值、左奇异向量的关系，其中$\boldsymbol{u}_j$和$\boldsymbol{v}_j$分别是矩阵$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$的第j列

奇异值分解的性质

- 类似地，由
$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}$$
得到
$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_j &= \sigma_j \boldsymbol{v}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, n \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_j &= 0, \quad j = n+1, n+2, \cdots, m \end{aligned}$$
这是矩阵$\boldsymbol{A}$的左奇异向量和奇异值、右奇异向量的关系

奇异值分解的性质

- （3）矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值分解中，奇异值$\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n$是唯一的，而矩阵$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$不是唯一的
- （4）矩阵$\boldsymbol{A}$和Σ的秩相等，等于正奇异值σ_i的个数r (包含重复的奇异值)

奇异值分解的性质

- （5）矩阵$\boldsymbol{A}$的r个右奇异向量$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_r$构成$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$的值域$R\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)$的一组标准正交基

  矩阵$\boldsymbol{A}$的$n-r$个右奇异向量$\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n$构成$\boldsymbol{A}$的零空间$N(\boldsymbol{A})$的一组标准正交基

  矩阵$\boldsymbol{A}$的r个左奇异向量$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r$构成值域$R(\boldsymbol{A})$的一组标准正交基

  矩阵$\boldsymbol{A}$的$m-r$个左奇异向量$\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m$构成$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$的零空间$N\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right)$的一组标准正交基

奇异值分解的计算过程

- **目标：**对$m \times n$矩阵$\boldsymbol{A}$进行奇异值分解
- **(1) 首先求 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量**
  计算对称矩阵
  $$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$$
  求解特征方程
  $$(\boldsymbol{W} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = 0$$
  得到特征值 λ_i，并将特征值由大到小排列
  $$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant 0$$
  将特征值 λ_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 代入特征方程求得对应的特征向量

奇异值分解的计算过程

- **(2) 求 n 阶正交矩阵 $\boldsymbol{V}$**
  将特征向量单位化，得到单位特征向量 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n$, 构成 n 阶正交矩阵 $\boldsymbol{V}$：

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_n \end{bmatrix}$$

奇异值分解的计算过程

- **(3) 求 $m \times n$ 对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$**
  计算 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

  构造 $m \times n$ 矩形对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$, 主对角线元素是奇异值, 其余元素是零,

$$\boldsymbol{\Sigma} = \operatorname{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$$

奇异值分解的计算过程

- **(4) 求 m 阶正交矩阵 $\boldsymbol{U}$**
  对 $\boldsymbol{A}$ 的前 r 个正奇异值，令

$$\boldsymbol{u}_j = \frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, r$$

  得到

$$\boldsymbol{U}_1 = \left[\begin{array}{cccc} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_r \end{array}\right]$$

  求 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的零空间的一组标准正交基 $\{\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$，令

$$\boldsymbol{U}_2 = \left[\begin{array}{cccc} \boldsymbol{u}_{r+1} & \boldsymbol{u}_{r+2} & \cdots & \boldsymbol{u}_m \end{array}\right]$$

  并令

$$\boldsymbol{U} = \left[\begin{array}{cc} \boldsymbol{U}_1 & \boldsymbol{U}_2 \end{array}\right]$$

奇异值分解的计算过程

- **(5) 得到奇异值分解**

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

注：上述过程只是一种奇异值分解算法，实际中有很多矩阵奇异值分解的高效算法。

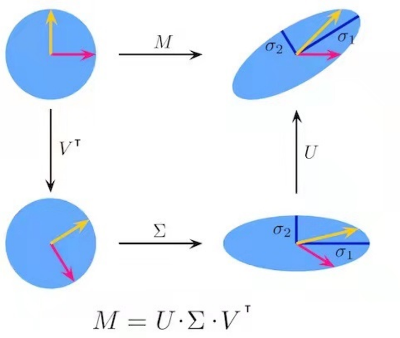
奇异值分解的计算过程

- **例4：** 试求矩阵

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

的奇异值分解。

奇异值分解的几何解释



- 见李航《统计学习方法》（第2版）P279-280

紧奇异值分解与截断奇异值分解

- 上述给出的奇异值分解$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$又称为矩阵的完全奇异值分解（full singular value decomposition）。
- 实际常用的是奇异值分解的紧奏形式和截断形式。
- 紧奇异值分解是与原始矩阵等秩的奇异值分解，截断奇异值分解是比原始矩阵低秩的奇异值分解。

紧奇异值分解与截断奇异值分解

- **紧奇异值分解**：设有$m \times n$实矩阵$\boldsymbol{A}$，其秩为$\operatorname{rank}(\boldsymbol{A}) = r$，$r \leqslant \min(m, n)$，则称$\boldsymbol{U}_r \Sigma_r \boldsymbol{V}_r^{\mathrm{T}}$为$A$的紧奇异值分解（compact singular value decomposition），即

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_r \Sigma_r \boldsymbol{V}_r^{\mathrm{T}},$$

其中$\boldsymbol{U}_r$是$m \times r$矩阵，$\boldsymbol{V}_r$是$n \times r$矩阵，Σ_r是r阶对角矩阵；矩阵$\boldsymbol{U}_r$由完全奇异值分解中$\boldsymbol{U}$的前r列、矩阵$\boldsymbol{V}_r$由$\boldsymbol{V}$的前r列、矩阵Σ_r由Σ的前r个对角线元素得到。紧奇异值分解的对角矩阵Σ_r的秩与原始矩阵$\boldsymbol{A}$的秩相等。

紧奇异值分解与截断奇异值分解

- **例5：** 由例3所给出的矩阵

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

的秩为3，A的紧奇异值分解是

$$A = U_r \Sigma_r V_r^{\mathrm{T}}$$

其中

$$U_r = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \sqrt{0.2} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{0.8} \end{bmatrix}, \quad \Sigma_r = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{5} \end{bmatrix}, \quad V_r^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

紧奇异值分解与截断奇异值分解

- 在矩阵的奇异值分解中，只取最大的k个奇异值（($k < r$, r为矩阵的秩）对应的部分，就得到矩阵的截断奇异值分解。实际应用中提到矩阵的奇异值分解时，通常指截断奇异值分解。
- **截断奇异值分解：** 设$\boldsymbol{A}$为$m \times n$实矩阵，其秩$\text{rank}(A) = r$，且$0 < k < r$，则称$\boldsymbol{U}_k \Sigma_k \boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}}$为矩阵$\boldsymbol{A}$的截断奇异值分解（truncated singular value decomposition）

$$\boldsymbol{A} \approx \boldsymbol{U}_k \Sigma_k \boldsymbol{V}_k^{\mathrm{T}},$$

其中$\boldsymbol{U}_k$是$m \times k$矩阵，$\boldsymbol{V}_k$是$n \times k$矩阵，Σ_k是k阶对角矩阵；矩阵$\boldsymbol{U}_k$由完全奇异值分解中$\boldsymbol{U}$的前k列、矩阵$\boldsymbol{V}_k$由$\boldsymbol{V}$的前k列、矩阵Σ_k由Σ的前k个对角线元素得到。对角矩阵Σ_k的秩比原始矩阵$\boldsymbol{A}$的秩低。

紧奇异值分解与截断奇异值分解

- **例6：** 由例3所给出的矩阵

$$
\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
$$

的秩为3，若取$k=2$则其截断奇异值分解是

$$
\boldsymbol{A} \approx \boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{U}_2 \boldsymbol{\Sigma}_2 \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}},
$$

其中

$$
\boldsymbol{U}_2=\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_2=\begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}
$$

这里的$\boldsymbol{U}_2, \boldsymbol{V}_2$是例3中的$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$的前 2 列，$\boldsymbol{\Sigma}_2$是$\boldsymbol{\Sigma}$的前2行前2列。

紧奇异值分解与截断奇异值分解

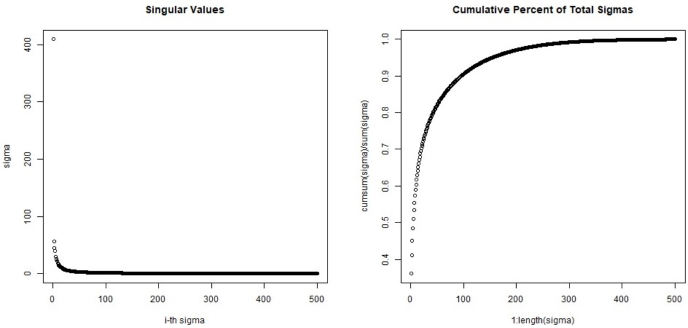
$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{U}_2 \Sigma_2 \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
$$

- $\boldsymbol{A}_2$与$\boldsymbol{A}$比较，$\boldsymbol{A}$的元素1和2在$\boldsymbol{A}_2$中均变成0。

紧奇异值分解与截断奇异值分解

- 在实际应用中，常常需要对矩阵的数据进行压缩，将其近似表示，奇异值分解提供了一种方法。
- 奇异值分解是在平方损失（弗罗贝尼乌斯范数）意义下对矩阵的最优近似。
  - 见李航《统计学习方法》（第2版）P287-290
- 紧奇异值分解对应着无损压缩，截断奇异值分解对应着有损压缩。
- 实际上，由于奇异值σ_i递减很快，所以k取很小值时，$\boldsymbol{A}_k$也可以对$\boldsymbol{A}$有很好的近似。
- 因此，截断奇异值分解得到的低秩矩阵$\boldsymbol{A}_k$实现了对原矩阵$\boldsymbol{A}$的压缩（低秩矩阵近似）。

紧奇异值分解与截断奇异值分解



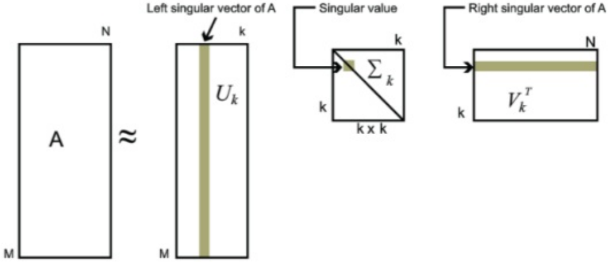
紧奇异值分解与截断奇异值分解

- 秩(rank)可以理解为矩阵所包含的信息的丰富程度。
- 例如在图像处理中，一张图片中的大部分成分是相似的，比如下面这张大草原的图片。

- 草原、蒙古包、人、马等是上图中包含的信息。
- 草原是由很多草组成的，而草是相似的，可以理解为草是草的复制品。
- 一张不错的图片的秩其实是比较低的，如果图像的秩比较高，往往是因为图像中的噪声比较严重。

奇异值分解的应用

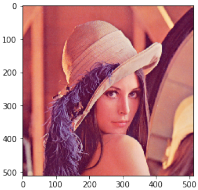
- **应用1：数据压缩**

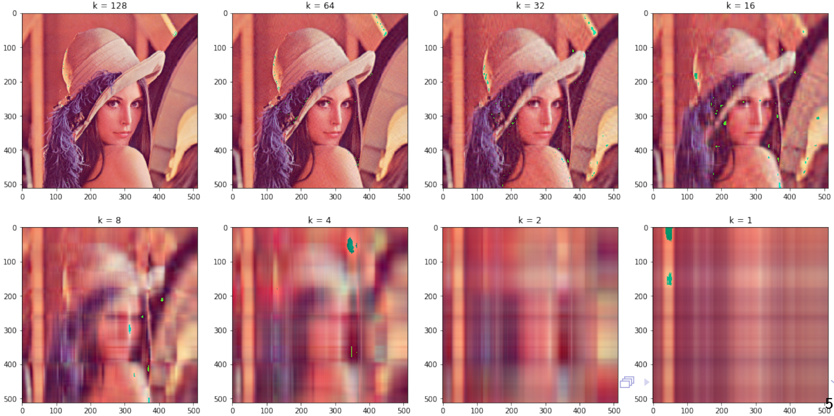


- 原矩阵的大小：$m \times n$
- 经过奇异值分解后的三个矩阵的大小：$m \times k + k + n \times k$

奇异值分解的应用

- 应用2：图像压缩





奇异值分解的应用

- **应用3：潜在语义分析**