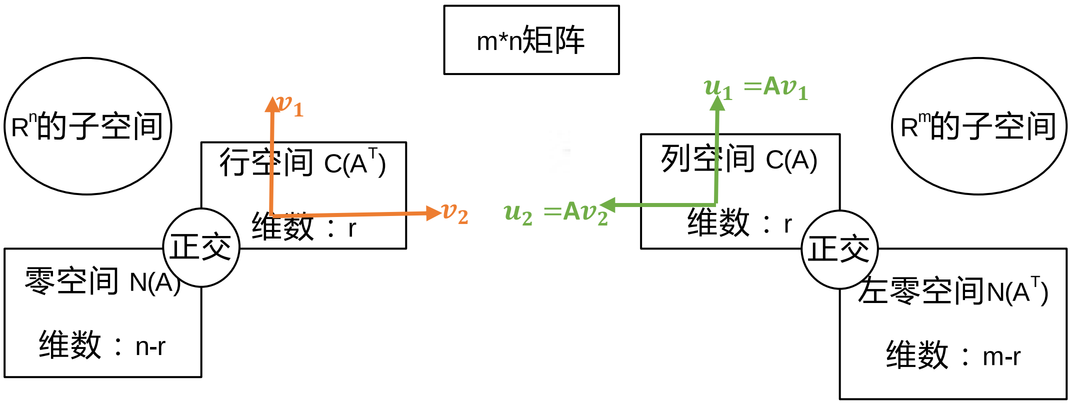
线性代数

-30 课 奇异值分解

一. 知识概要

本节介绍矩阵的奇异解分解，本质就是将行空间的一组正交基变换成列空间里的一组正交基。示意如下图



二. 奇异值分解 SVD

2.1 基变换

对矩阵做奇异值分解，首先如上图，先在行空间中找一组正交基v_1，v_2，....v_i，然后通过矩阵 A 对其进行线性变换，得到列空间中一组正交基u_1，u_2，....u_i。

$$Av_i = \sigma_i u_i$$

注：（1） v_i是单位的，将其变换之后的u_i也是单位的，对应的σ_i就是伸缩因子

（2） 找行空间的一组正交基方法：我们之前学习的格拉姆-施密特正交化方法就可以在行空间中得到一组正交基v_1，v_2，....v_i。

2.2 矩阵形式

接下来将我们这个过程用矩阵形式表示出来，

$$A\begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \dots & v_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_r \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_1 & & \\ & & \dots & \\ & & & \dots \end{bmatrix}$$

$\leftrightarrow \ AV = U\sum$

- v_i对应的是行空间中的基向量；
- u_i对应的是列空间中的基向量；
- σ_i对应的是伸缩因子；

我们的任务就是由给定矩阵 A 得到其余三者。
即：

$$AV = U\sum$$

简单变形：

$$A = U\sum V^{-1} = U\sum V^{T}$$

（因为 V 与 U 都是正交基构成的正交矩阵，转置即为逆）

这个形式就是 SVD 分解：$A = U\sum V^{-1}$。任意矩阵都可以被分解为这个形式。即两个正交矩阵 U,V 以及一个对角矩阵$\sum$ 。

2.3 计算方法

但是在这种变形方式中，U 与 V 并不好同时寻找，我们考虑使用变形技巧来简化求解过程，如：

假设现在希望做些处理，将 U 消去。

使用$A^T A$运算，利用 U 是正交阵的性质：

$$A^T A = V\sum U^T U\sum V^T = V\begin{bmatrix} {\sigma_1}^2 & & & \\ & {\sigma_2}^2 & & \\ & & \cdots & \\ & & & \cdots \end{bmatrix}V^T$$

这样变形之后，我们就只需要选择 V 就可以了。同样，我们经过相似处理，使用AA^T运算，这样剩下的就是 U 矩阵。

我们在看看这个$A^T A$矩阵形式，回顾之前对称矩阵分解(26 课)形式，发现满足以下形式：

$$A^T A = Q \wedge Q^T$$

也就是说，这个式子就是$A^T A$这个对称矩阵(也是正交矩阵)的分解，V 由$A^T A$这个矩阵的线性无关的特征向量标准化后构成(就是我们选取的行空间中的基)，而中间的对角阵则是$\sum$ 则是由$A^T A$的特征向量${\sigma_i}^2$构成。

这意味着：我们通过矩阵$A^T A$的特征值与特征向量就可以确定v_i和σ_i。同样，计算AA^T就能确定u_i。

下面我们来通过一个例子来熟悉上述流程：

【例】已知：$A=\begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix}$

解：

先计算A^TA，为得到 V 与σ做准备。

$$A^TA=\begin{bmatrix} 25 & 7 \\ 7 & 25 \end{bmatrix}$$

对应求其特征值，特征向量，并将特征向量标准化
得到：

$$\lambda_1=32，x_1=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$\lambda_2=18，x_2=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

接下来，我们来求AA^T来确定u_i
由：

$$AA^T=U\sum V^TV\sum{}^TU^T=U\sum\sum{}^TU^T$$

又：

$$AA^T=\begin{bmatrix} 32 & 0 \\ 0 & 18 \end{bmatrix}$$

求得其对应的特征值与特征向量为：

$$\lambda_1=32，x_1=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_2=18，x_2=\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

注：如果观察得仔细我们不难发现这里得到的特征值与之前的是一样的。事实上，存在性质：BA 与 AB 的特征值相同。

完成了各个矩阵求解的工作，对应之前提到的分解式：$A=U\sum V^{-1}=U\sum V^T$

如果直接代入我们会得到：

$$\begin{bmatrix} 4 & 4 \\ 3 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{32} & 0 \\ 0 & \sqrt{18} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

这就出现了问题，之前的矩阵明明是$\begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix}$，为什么这里计算出来的符号有问题呢？

出错的原因：

我们无法确定特征向量的符号，或者说，求出的一组特征向量 U 的反向依然满足我们求解 U 的过程。原本 V 与 U 的方向时有关联的，但是我们上面求解过程无法考虑这种关联。

解决办法：

使用最原始的公式：

$$\sigma_i u_i = A v_i$$

如果确定了 v 与σ，直接代入，就能得到 u 了。这样就将 u 与 v 的关系连接了起来。

注意到，上述得到 u，v，σ 的过程都是通过变形计算得到。事实上，对于部分内容我们可以从其内容出发直接得到，下面我们通过例 2 来进行说明。

【例 2】$A = \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 8 & 6 \end{bmatrix}$，对其进行奇异值分解。

分析：

易知 A 秩为 1，对应的行空间是一条直线，即（4,3）的倍数，零空间是与之垂直的一条直线。

而同时，A 对应的列空间也是一条直线，即（4,8）的倍数，左零空间是与之垂直的一条直线。

于是，由奇异值分解式的意义，行空间方向上的基：$\begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.6 \end{bmatrix}$，零空间方向上的基：$\begin{bmatrix} -0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix}$。列空间方向：$u_1 = 1/\sqrt{5}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$，左零空间方向：$1/\sqrt{5}\begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}$。我们要寻找的 SVD，就是一种转换方式，将行空间与零空间上的基转换为列空间与左零空间上的基。

就可以很快地得到矩阵 U：

$$U=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & -1\end{bmatrix}$$

类似的，我们可以得到：

$$V^T=\begin{bmatrix}0.8 & 0.6\\ 0.6 & -0.8\end{bmatrix}$$

余下过程与例 1 类似，通过求矩阵 A^TA 的特征值来得到对角矩阵$\sum$ 。代入公式 $A = U\sum V^T$ 完成最后的分解步骤。

【总结】

回忆这个奇异值分解的过程，我们所做的就是在线性代数的四个子空间中选出合适的基。

- 从v_1到v_r是矩阵行空间的标准正交基；
- 从u_1到u_r是矩阵列空间的标准正交基；
- 从v_{r+1}到v_n是矩阵零空间的标准正交基；
- 从u_{r+1}到u_n是对应的转置矩阵的零空间的标准正交基。

【进一步理解】

最后，让我们再来理解一下等式：$Av_i=\sigma_i u_i$

这表明：

（1）左式与右式是倍数关系

（2）A 乘以每一个 v 对应一个 u 的方向

三. 学习感悟

SVD 很重要，与最小二乘法也有一定的联系。这部分内容主要是将之前学习的内容进行应用与联系。其实 SVD 的用处远不止我们介绍的这些而已。它还可以减小一些计算量，进行图像变换等。