Solution: 奇异值分解
Singular Value Decomposition

Let $\hat{Y}$ be the centered $d \times N$ data matrix (assume $N > d$).

Singular values

$$\sum_i \mathbf{y}_i = \mathbf{0} \qquad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_{1,1} & \boxed{\begin{matrix} y_{2,1} \\ y_{2,2} \\ \vdots \\ y_{2,d} \end{matrix}} & y_{3,1} & \cdots & y_{N,1} \\ y_{1,2} & & y_{3,2} & \cdots & y_{N,2} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{1,d} & & y_{3,d} & \cdots & y_{N,d} \end{pmatrix}_{d\times N} = \mathbf{USV}^{\mathrm{T}}$$

$\boldsymbol{y}_2$

共轭x自己

Unitary Matrices 酉矩阵

is the SVD of $\hat{\mathbf{Y}}$, where

正交阵即$A^TA=I$

- ➢ ***U*** **is *d*×*d* orthogonal, the left singular vectors.**
- ➢ ***V*** **is *N*×*N* orthogonal, the right singular vectors.**
- ➢ ***S*** **is *d*×*N* diagonal, with $s_1 \geq s_2 \geq \ldots \geq s_d \geq 0$, the singular values.**

对角阵

- ✓ **The SVD always exists, and is unique up to signs.**
- ✓ **The columns of V are the principal components**

SVD奇异值分解

相当于将特征值分解(仅针对常规方阵)

扩展到任意 m×n 矩阵

* 在我理解中，某一 m×n 矩阵 A 的作用相当于映射空间，

找有一组 n维空间正交基，使 A 矩阵对指另一个空间 K，

空间 K 的维度与 A 的秩相同，即 k = rank(A)，

找到用 A 将 n维空间正交基 映射(降维) 到 k维空间

现有：

- n维空间正交基 $\{v_1, \cdots, v_n\}$

↓ 经矩阵 $A_{(m\times n)}$ 映射，此时仅可以保留 k 维，$k = Rank(A)$

$$\{Av_1, Av_2, \cdots, Av_n\}$$

若映射后仍为正交基，则有

$$Av_i \cdot Av_j = (Av_i)^T Av_j = v_i^T A^T A v_j = 0 \quad \forall i, j \in \{1, \cdots, n\}$$

推证上式如下：

由于是n维空间正交基，所有

$$v_i^T v_j = v_i \cdot v_j = 0$$

$$\therefore \quad v_i^T A^T A v_j = v_i^T \lambda_j v_j = \lambda_j v_i^T v_j = \lambda_j v_i v_j = 0$$

把正交化新的正交基：

$$Av_i \cdot Av_i = \lambda_i v_i \cdot v_i = \lambda_i \quad \Rightarrow \quad u_i = \frac{Av_i}{|Av_i|} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} Av_i$$

$$\therefore |Av_i|^2 = \lambda_i \geq 0$$

$$\therefore \begin{cases} Av_i = \sigma_i u_i \\ \sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (\text{奇异值}) \end{cases} \qquad 0 < i < \underset{\overset{\shortparallel}{k}}{Rank(A)}$$

由上可得:

正交基 $u_1, \cdots, u_k$ (若 $k<m$, 则将之扩展到 m 维)

则有 m 维空间 R^m 中正交基 $\{u_1, \cdots, u_m\}$

现在有:

$\mathrm{Rank}(A)=k$ ∴ 仅有 k 维可扩

$$\underset{\triangle}{A}\,\underbrace{[v_1\, v_2 \cdots v_k \mid v_{k+1} \cdots v_n]}_{\text{原正交基}} = [u_1\, u_2 \cdots \underset{\triangle}{u_k} \mid \underbrace{u_{k+1} \cdots u_m}]$$

原矩阵

剩余的用于填充满 m 维空间 R^m

投影得到新正交基

归一化

$$\left[\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & \sigma_k & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right]$$

σ_i 为奇异值

由此可得

A矩阵的奇异值分解为

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

U：$m\times m$ 的正交阵

其中的 u_i 为 AA^T 的特征向量

称为 A 的左奇异向量

Σ：$m\times n$ 的对角阵

V^T：$n\times n$ 的正交阵

其中的 v_i 为 A^TA 的特征向量

即右奇异向量

现对A做简缩分解

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

$$A = \left[\begin{array}{ccc|ccc} u_1 & \cdots & u_k & u_{k+1} & \cdots & u_m \end{array}\right] \left[\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & \sigma_k & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} v_1^T \\ \vdots \\ v_k^T \\ \hline v_{k+1}^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{array}\right]$$

分块乘法 $\Downarrow$

$$A = \begin{bmatrix} u_1 & \cdots & u_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_k^T \end{bmatrix}$$

令

$$\begin{cases} X = \begin{bmatrix} u_1 & \cdots & u_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 u_1 & \cdots & \sigma_k u_k \end{bmatrix} \\ Y = \begin{bmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_k^T \end{bmatrix} \end{cases}$$

则：$A = XY$，即为A的满秩分解

Solution:
Singular Value Decomposition

Let $\hat{Y}$ be the centered $d \times N$ data matrix (assume $N > d$).

Singular values

$$\sum_i \mathbf{y}_i = \mathbf{0} \qquad \hat{\mathbf{Y}} = \begin{pmatrix} y_{1,1} & y_{2,1} & y_{3,1} & \cdots & y_{N,1} \\ y_{1,2} & y_{2,2} & y_{3,2} & \cdots & y_{N,2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{1,d} & y_{2,d} & y_{3,d} & \cdots & y_{N,d} \end{pmatrix}_{d \times N} = \mathbf{USV}^{\mathrm{T}}$$

$\mathbf{y}_2$

Unitary Matrices

$$\boxed{\arg\min_{\mathbf{X},\mathbf{W}} \left\| \mathbf{Y} - \mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{W} \right\|}$$

$$\boxed{\mathbf{X} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}}, \mathbf{W} = \mathbf{SV}^{\mathrm{T}}}$$

Compute eigen~ (vectors and values)

- Eigen problem $\mathbf{Z}\mathbf{V} = \lambda\mathbf{V}$

  λ为特征值
  V为特征向量

- Characteristic polynomial

$$\det(\mathbf{Z} - \lambda\mathbf{I}) = 0$$

- Iterative method (when matrix is very huge)
  - Simplest method: $\mathbf{v}^{(n+1)} = \mathbf{Z}\,\mathbf{v}^{(n)}$

    (超过五次迭代不再有精确解)

    不断迭代

  - Mostly used method: Lanczos method
    - http://en.wikipedia.org/wiki/Lanczos_algorithm

EVD 特征值分解

- 特征值 λ_i
- 单位特征向量 x_i
- 满秩对称阵 A $(m \times m)$

$$\Rightarrow \begin{aligned} A X_1 &= \lambda_1 X_1 \\ A X_2 &= \lambda_2 X_2 \\ &\vdots \\ A X_m &= \lambda_m X_m \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$AU = U\Lambda$$

$$\begin{cases} U = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_m] \\ \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_m \end{bmatrix} \end{cases}$$

由于对称阵特征向量两两正交

$\therefore$ U为正交阵 $(U^T = U^{-1})$

$$A = U\Lambda U^{-1} = U\Lambda U^T$$

正交阵性质
转置=逆

把特征的向量 X 分解到A对应空间中：

$$Ax = U\Lambda U^T x$$

（即映射到A之特征向量构成的坐标系中）

$$x = a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_mx_m$$

$$\underbrace{U\Lambda U^T x}_{\text{分解这一部分}} = U\Lambda \underbrace{\begin{bmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_m^T \end{bmatrix}}_{\text{A的特征向量们}} \underbrace{(a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_mx_m)}_{\text{x用}x_i\text{表示的形式}} = U\Lambda \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}$$

$$U\Lambda \begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_m\end{bmatrix} = U\begin{bmatrix}\lambda_1&&&\\&\lambda_2&&\\&&\ddots&\\&&&\lambda_m\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_m\end{bmatrix} = U\begin{bmatrix}\lambda_1 a_1\\ \lambda_2 a_2\\ \vdots\\ \lambda_m a_m\end{bmatrix}$$

打开 Λ

* 此时若A不满秩

则有 $\lambda_k a_k = 0$

则存在维度退化