奇异值分解 singular value decomposition

• 在数学中一般用x,y,z等小写字母表示未知数,表示 向量时,如果是手写体需要在字母上加箭头,打印 体需要用黑体。由于在机器学习中很少表示单个数 字(模型学习的数据最少也是多个维度的向量), 所 以一般手写时可以不加箭头。由于本课件用到了较 多的数学知识及单个数字, 以及黑体表示在计算机 上显示的并不十分清楚,为了避免混淆,本课件中 的向量一律用小写字母加箭头的形式表示,单个数 字以小写字母的形式表示,矩阵以大写字母的形式 表示。

奇异值分解用途1:降维

• 一个3×3的矩阵需要存储9个数字,但如果能把这个矩阵分解成一个3×1的列向量和一个1×3的行向量相称,就可以只存储6个数字。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} (2 \quad 3 \quad 4) = \begin{pmatrix} 2 \quad 3 \quad 4 \\ 4 \quad 6 \quad 8 \\ 6 \quad 9 \quad 12 \end{pmatrix}$$

 奇异值分解降维的主要原理就是通过向量相乘取 代原矩阵以节省存储空间(所需的向量一般不止两 个)。

奇异值分解用途2: 推荐系统

 奇异值分解可以提高推荐系统的效果。2006年末, 电影公司netflix(网飞)举办了一次奖金为100万美 元的比赛,奖励可以提出比当时最好的推荐系统 效果好10%的参赛者。最后的获奖者Yehuda Koren 用的就是奇异值分解。

特征值和特征向量

$$\vec{Ax} = \lambda \vec{x}
\begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 \\ -2 & 1 & -2 \\ 0 & -2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ -4 \\ -4 \end{pmatrix} = (-2) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

特征值分解

• A为n×n的方阵, $\vec{q}_1, \vec{q}_2, \cdots \vec{q}_n$ 为A的特征向量, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$,为其对应的特征值, $Q = \left(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \cdots \vec{q}_n\right)$ 则

$$AQ = A(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \cdots \vec{q}_n) = (A\vec{q}_1, A\vec{q}_2, \cdots A\vec{q}_n)$$

$$= (\lambda_1 \vec{q}_1, \lambda_2 \vec{q}_2, \cdots \lambda_n \vec{q}_n)$$

$$= (\vec{q}_1, \vec{q}_2, \cdots \vec{q}_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

特征值分解

$$AQ = Q \land$$

$$A = Q \land Q^{-1}$$

$$Q^{-1}AQ = \land$$

或者

其中对角矩阵A对角线上的元素均为矩阵A的特征值,且从大到小排列,此过程称为特征值分解。

例1特征值分解

• 将下面的矩阵进行特征值分解

$$\begin{pmatrix}
2 & -2 & 0 \\
-2 & 1 & -2 \\
0 & -2 & 0
\end{pmatrix}$$

例1特征值分解

(1)求特征值:

$$|A - \lambda E| = \begin{vmatrix} 2 - \lambda & -2 & 0 \\ -2 & 1 - \lambda & -2 \\ 0 & -2 & \lambda \end{vmatrix} = (1 - \lambda)(\lambda - 4)(\lambda + 2)$$

可得特征值为 λ_1 =4, λ_2 =1, λ_3 =-2

(2)将*λ*=4带入,可以得到

$$(A-4E)x=0$$

解得特征向量 $\vec{p}_1 = \frac{1}{3}(2,-2,1)^T$

例 1 特征值分解

将另外两个特征值代入,可以得到

$$\vec{p}_2 = \frac{1}{3} (2,1,-2)^T, \vec{p}_3 = (1,2,2)^T$$

$$\Leftrightarrow P = (\overrightarrow{p}_1, \overrightarrow{p}_2, \overrightarrow{p}_3)$$

则有

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 4 & & \\ & 1 & \\ & & -2 \end{pmatrix}$$

• 普通方阵不一定可以进行特征值分解,但实对称 矩阵一定可以,矩阵A是实对称矩阵时,有

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

或者

$$Q^T A Q = \Lambda$$

• A、Q、 Λ 为同阶方阵, $Q^T = Q^{-1}$

实对称矩阵的性质

定理一:实对称矩阵的特征值均为实数,特征向量均为非零实向量。

定理二:实对称矩阵不同特征值对应的特征向量相互正交。

定理三: 若一空间为实对称矩阵A的不变子空间,则其正交补空间也为A的不变子空间。

定理四:n阶实对称矩阵A有n 个单位正交特征向量。

实对称矩阵的特征值均为实数

$$\vec{Ax} = \vec{\lambda x}$$

两边均取共轭转置可以得到:
$$\left(\overrightarrow{Ax}\right)^{H} = \left(\overrightarrow{\lambda x}\right)^{H}$$

$$\vec{x}^H A^H = \vec{x}^H \lambda^H$$

A为实对称矩阵,共轭转置与原矩阵相同 $\vec{x}^H A = \vec{x}^H \lambda^H$

两边同时右乘向量x可得: $\vec{x}^H A x = \vec{x}^H \lambda^H \vec{x}$

$$\lambda \vec{x}^H x = \lambda^H \vec{x}^H \vec{x}$$

 $(\lambda - \lambda^H) \vec{x} \vec{x} = 0, \vec{x}$ 为非零向量,所以 $\vec{x} \vec{x} \vec{x}$ 不为零

特征向量均为非零实向量

- 特征向量为0向量时,特征值失去意义,所以特征向量一定为非零向量。
- •特征向量可由 $|A \lambda E|\hat{x} = 0$ 求出,该式为n元一次方程组,系数均为实数,所以求出的解系也一定由实数组成,所以实对称矩阵特征向量均为非零实向量。

不同特征值对应的特征向量相互正交

$$\vec{Ax} = \lambda \vec{x}, \vec{Ay} = \mu \vec{y}$$

$$(\vec{Ax})^T = (\lambda \vec{x})^T$$

$$\vec{Ax} = \lambda \vec{x} + \lambda \vec{x} = \lambda \vec{x}$$

$$\vec{x}^T A = \lambda \vec{x}^T$$

两边同时右乘向量 $y: \vec{x} A \vec{y} = \lambda \vec{x} \vec{y}$

$$\mu \vec{x} \vec{y} = \lambda \vec{x} \vec{y}$$

$$(\mu - \lambda)\vec{x}^T \vec{y} = 0$$

$$\vec{x} \vec{y} = 0$$

若一空间为实对称矩阵A的不变子空间,则其 正交补空间也为该矩阵的不变子空间。

• A为n阶实对称矩阵,子空间 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 为A的不变子空间, S^{\perp} 为S的正交补空间。假设 S^{\perp} 中有一个向量y,则对于S中的任意一个向量x有

$$\left(\overrightarrow{Ay}\right)^T \overrightarrow{x} = \overrightarrow{y}^T \overrightarrow{Ax} = 0$$

• 所以 \overrightarrow{Ay} 正交于S中的任意一个向量,一定也在其正交补空间中,即A的不变子空间的正交补空间也为A的不变子空间。

第一步,找到实对称矩阵A的一个单位特征向量x,对应的特征值为 λ_1 。

第二步,将此向量扩展为一个 \mathbb{R}^n 的子空间,该空间维度为1,正交补空间的维度为 \mathbb{R}^n 1。

第三步,找到正交补空间的n-1个标准正交基

$$\left\{\overrightarrow{y}_{1}, \overrightarrow{y}_{2}, \cdots, \overrightarrow{y}_{n-1}\right\}$$

第四步,将x与 $\left\{\vec{y}_1,\vec{y}_2,\dots,\vec{y}_{n-1}\right\}$ 组成矩阵 Q_1 ,可以得到:

$$AQ_1 = A(\vec{x}, \vec{y}_1, \vec{y}_2, \cdots \vec{y}_{n-1}) = (A\vec{x}, A\vec{y}_1, A\vec{y}_2, \cdots A\vec{y}_{n-1})$$

根据定理三可知, $\{\vec{y}_1, \vec{y}_2, \cdots, \vec{y}_{n-1}\}$ 所确定的空间也为A的不变子空间,所以

$$\overrightarrow{Ay_1} = \overrightarrow{b_{1,1}y_1} + \overrightarrow{b_{2,1}y_2} + \dots + \overrightarrow{b_{n-1,1}y_{n-1}}$$

同理,其他的 $\overrightarrow{Ay_i}$ ($i=2,3,\cdots,n-1$) 也可以由 $\left\{\overrightarrow{y_1},\overrightarrow{y_2},\cdots,\overrightarrow{y_{n-1}}\right\}$ 线性表出。

于是:

$$AQ_{1} = A(\vec{x}, \vec{y}_{1}, \vec{y}_{2}, \cdots \vec{y}_{n-1}) = (A\vec{x}, A\vec{y}_{1}, A\vec{y}_{2}, \cdots A\vec{y}_{n-1})$$

$$= (\vec{x}, \vec{y}_{1}, \vec{y}_{2}, \cdots \vec{y}_{n-1}) \begin{pmatrix} \lambda_{1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_{11} & \cdots & b_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & b_{n-1,1} & \cdots & b_{n-1,n-1} \end{pmatrix}$$

$$(\lambda_{1} & 0 & \cdots & b_{n-1,n-1})$$

$$=Q_1\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & B_1\end{pmatrix}$$

• 其中 Q_1 是正交矩阵,即 $AA^T = E$,所以

$$Q_{1}^{T}AQ_{1} = Q_{1}^{-1}AQ_{1} = \begin{pmatrix} \lambda_{1} & 0 \\ 0 & B_{1} \end{pmatrix}$$

左右均转置可以得到

$$Q_1^T A Q_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & B_1^T \end{pmatrix}$$

所以B₁也为实对称矩阵

所以 B_1 可以写成如下形式:

$$P^T B_1 P = \begin{pmatrix} \lambda_2 & 0 \\ 0 & B_2 \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow Q_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{pmatrix}$$

于是,

$$Q_{2}^{T}Q_{1}^{T}AQ_{2}Q_{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P^{T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_{1} & 0 \\ 0 & B_{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \lambda_{1} & 0 \\ 0 & P^{T}B_{1}P \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \lambda_{1} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{2} & 0 \\ 0 & 0 & B_{2} \end{pmatrix}$$

• 重复以上过程,可以得到:

重复以上过程,可以得到:
$$Q_{n-1}^T \cdots Q_2^T Q_1^T A Q_1 Q_2 \cdots Q_{n-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

令 $Q = Q_1Q_2\cdots Q_{n-1}$,则Q也为正交阵,且

$$Q^{T}AQ = \begin{pmatrix} \lambda_{1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_{2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{n} \end{pmatrix}$$

n阶实对称矩阵有n个正交特征向量

把上一步中得到的矩阵写成列向量的形式可以得到:

$$A(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \cdots, \vec{q}_n) = (\vec{q}_1, \vec{q}_2, \cdots, \vec{q}_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

即 $\vec{Aq_1} = \lambda_1 \vec{q_1}, \vec{Aq_2} = \lambda_2 \vec{q_2}, \cdots$,同时由于Q为正交阵,每一个列向量均相互正交,所以n阶是对称矩阵有n个正交的特征向量。

普通矩阵奇异值分解形式推导

- 特征值分解要求原矩阵是方阵,且此方阵需要满足一定的条件(满足条件的非对称矩阵也可以)。奇异值分解其实可以看做是特征值分解在任意矩阵(m×n)上的推广形式。
- 若矩阵A的大小为m×n,则 AA^T 为m阶实对称方阵, A^TA 为n阶实对称方阵,则有 $AA^T=P\Lambda_1P^T$, $A^TA=Q\Lambda_2Q^T$ 。

普通矩阵奇异值分解形式推导

$$AA^T = P \wedge_1 P^T = P \Sigma \Sigma^T P^T$$

- 其中 Σ 是一个对角矩阵,由于 $QQ^T = E$,所以 $AA^T = P\Sigma\Sigma^T P^T = P\Sigma Q^T Q\Sigma^T P^T = P\Sigma Q^T (P\Sigma Q^T)^T$
- 同理可以拆分 A^TA ,所以

$$A = P\Sigma Q^T$$

- Σ主对角线上的元素称为奇异值。
- 奇异值不是奇怪的值的意思。

此页只是推导 A的形式怎么 来的,不能作 为证明

singular 英 [ˈsɪŋgjələ(r)] → ② 美 [ˈsɪŋgjələ-] → ③

adj. 奇特的; 非凡的; <语>单数的; <正>突出的;

奇异值分解各矩阵性质

- *P*为m阶方阵, *Q*为n阶方阵, 且均为正交阵(每一个列向量都是单位向量, 且每两个列向量之间相互正交)。
- Σ的大小为m×n
- Λ_1 和 Λ_2 均为对角矩阵,且主对角线上的非零元素相同 (即 AA^T 和 A^TA 非零特征值相同)
- 若 A^TA 的非零特征值有k个,分别为 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k$,则 Σ 主 对角线上的非零元素分别为 $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, ..., \sqrt{\lambda_k}$

例 2

• 求矩阵
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
的奇异值分解

解:
$$AA^T = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
, 特征值分别为4, 0, 0, 对应的特征向量为

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

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

各个特征向量要 化为单位向量, 且相互正交

例 2

• $A^TA = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$,特征值为4,0,对应的特征向量分别为 $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$, $\left(-\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$, $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$,

•
$$Q = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$
,矩阵 Σ 对角线上的非零元素为 $\sqrt{4} = 2$,

• 矩阵A的奇异值分解为 $A = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0\\ 0 & 0\\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2}\\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$

二次型

- 含有n个变量的二次齐次函数称为二次型: $f(x_1, x_2, \dots, x_n) = a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + \dots + a_{mn}x_n^2$
- 二次型可以表示为矩阵形式:

$$f(\vec{x}) = \vec{x}^T A \vec{x}$$

其中, $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots x_n)^T$
 $x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2$ 就是一个二次型

转化成矩阵形式为 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$

半正定二次型

- 对于任意的向量 \vec{x} 都有 \vec{x} $\vec{A}\vec{x} \ge 0$,则称该二次型为半正定二次型。
- 一个二次型半正定等价于实对称矩阵矩阵A的所有特征值非负。

$$\vec{x}^T A A^T \vec{x} = \left(A^T \vec{x} \right)^T \left(A^T \vec{x} \right)$$

 $\overrightarrow{A}^T \overrightarrow{x}$ 为列向量,设 $\overrightarrow{y} = \overrightarrow{A}^T \overrightarrow{x}$,则原二次型可以表示为: $\overrightarrow{y}^T \overrightarrow{y}$,一定非负,所以 $\overrightarrow{A} \overrightarrow{A}^T$ 的特征值一定非负,奇异值不会出现虚数。

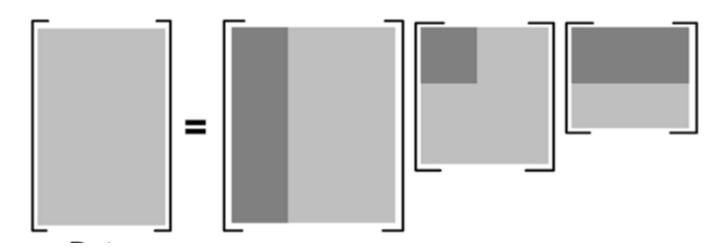
奇异值分解降维

• 对矩阵A进行奇异值分解,有 $A = P\Sigma Q^T$,假设

$$P = (\overrightarrow{p}_1, \overrightarrow{p}_2, \cdots \overrightarrow{p}_m), Q = (\overrightarrow{q}_1, \overrightarrow{q}_2, \cdots \overrightarrow{q}_n), \sigma_1, \sigma_2, \dots$$
为其奇异值,则
$$A = P\Sigma Q = \overrightarrow{\sigma}_1 \overrightarrow{p}_1 \overrightarrow{q}_1 + \overrightarrow{\sigma}_2 \overrightarrow{p}_2 \overrightarrow{q}_2 + \cdots$$

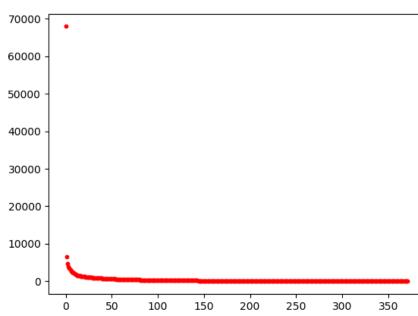
• 如果奇异值是从大大小排列,则一般来说,有很大可能上式中 $\sigma_1 p_1 q_1 > \sigma_2 p_2 q_2 > \sigma_3 p_3 q_3 > \cdots$,大于号的意思是前面的项构成的矩阵与后面的项构成的矩阵相比更接近原矩阵。上述不等式单项可能不成立,但前面若干项一般可以包含原矩阵绝大多数的信息。

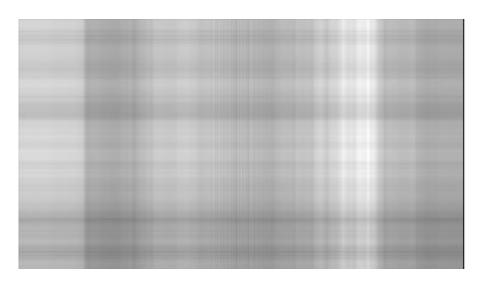
奇异值分解降维

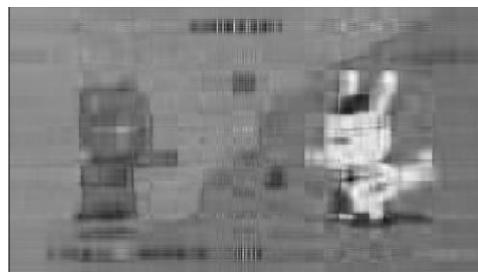


$$A_{m imes n} = P_{m imes m} \Sigma_{m imes n} \left(Q_{n imes n} \right)^{T}$$
 $A_{m imes n} pprox P_{m imes k} \Sigma_{k imes k} \left(Q_{n imes k} \right)^{T}$









1个奇异值

10个奇异值





20个奇异值

50个奇异值

- 思考:对于一个660×372的图片,存储原图片需要多少空间?只取前50个奇异值进行分解简化后再存储需要多少空间?
- •原图片需要存储660×372个像素值。

例 3

短阵
$$A = \begin{pmatrix} 5 & 5 & 0 & 5 \\ 5 & 0 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 5 & 3 \\ 5 & 4 & 4 & 5 \\ 5 & 4 & 5 & 5 \end{pmatrix}$$

• 奇异值分解可以得到:

1 [17. 71392084 6. 39167145 3. 09796097 1. 32897797]

```
[-0. 22279713 -0. 51723555 0. 82462029 0. 05319973]
[ 0. 67492385 -0. 69294472 -0. 2531966 0. 01403201]
[ 0. 41086611 0. 26374238 0. 32859738 -0. 80848795]]
```

[-0.57098887 - 0.4274751 - 0.38459931 - 0.58593526]

P保留前两列

[-0.44721867 -0.53728743]

[-0. 35861531 0. 24605053

[-0.29246336 -0.40329582

[-0. 20779151 0. 67004393

[-0.50993331 0.05969518

[-0.53164501 0.18870999

前两个奇异值

[17. 71392084 6. 39167145

```
[-0.57098887 -0.4274751 -0.38459931 -0.58593526]
```

[-0.22279713 -0.51723555 0.82462029 0.05319973]

Q保留前两行

简化后的矩阵

```
[ 5. 28849359  5. 16272812  0. 21491237  4. 45908018]
```

- [3. 27680994 1. 90208543 3. 74001972 3. 80580978]
- [3.53241827 3.54790444 -0.13316888 2.89840405]
- [1.14752376 -0.64171368 4.94723586 2.3845504]
- [5. 07268706 3. 66399535 3. 78868965 5. 31300375]
- [5. 10856595 3. 40187905 4. 6166049 5. 58222363]]

原矩阵

5	5	0	5
5	0	3	4
3	4	0	3
0	0	5	3
5	1	1	5

奇异值分解提高推荐系统 效果

基于协同过滤的推荐引擎

	商品1	商品2	商 品 3	商 品 4
用户1	(3)	4	4	5
用户 2	3	5	4	5
用户3	1	2	2	1
用户4	2	1	1	3)

实际中的数据集

作业

• 求下面矩阵的奇异值分解,

• 要求(1)写出过程,(2)至少有一个矩阵通过计算AA^T和A^TA的特征值和特征向量的方式求特征值分解。