奇异值分解简称 SVD, 是对矩阵最好的分解, 对干任意矩阵都有:

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

其中 U、V 均是正交矩阵, Σ 是对角矩阵。

正定矩阵中学过,对称矩阵可分解为: $A = Q\Lambda Q^T$,这里只需要一个矩阵 Q 就可以将对称矩阵分解,这个也是正定矩阵的奇异值分解。

在对角化中,可对角化的矩阵可分解为: $A = S\Lambda S^{-1}$,这里的 S 不是正交阵,所以这不是奇异值分解。

现在我们希望在矩阵 A 的列空间中选取一组标准正交基, v_1 , v_2 … v_r ,这组基在矩阵 A 的映射下,转化为行空间的一组标准正交基 u_1 , u_2 … u_r 。即

$$Av_1 = \sigma_1 u_1$$
....
$$Av_r = \sigma_r u_r$$

写成矩阵的形式:

$$A[v_1 \quad v_2 \quad \dots \quad v_r] = \begin{bmatrix} \sigma_1 u_1 & \sigma_2 u_2 & \dots & \sigma_r u_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & \dots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & \cdots & \sigma_r \end{bmatrix}$$

其中σ称为缩放因子,在转换的过程中,有可能有伸缩或者拉伸。如果加上零空间 和左零空间,有:

此时的 $V \neq n \times n$ 矩阵, $U \neq m \times m$ 矩阵, $\Sigma \neq m \times n$ 的对角矩阵 $\sigma_1 \cdots \sigma_r$ 在对角线上, 其余元素均为 0。

根据矩阵形式,写为:AV= UΣ,右乘 V^{-1} ,有 A= UΣ V^{-1} ,又因为 V 是正交矩阵,所以有:

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

下面我们来看一下 U 和 V 分别的含义(假定 A 是可逆方阵):

- 1) $A = U\Sigma V^T$, 左乘 A^T , 有: $A^T A = V\Sigma^T U^T U\Sigma V^T = V\Sigma^T I\Sigma V^T = V\Sigma^T \Sigma V^T = V\Sigma^2 V^T$ 可以将 V 看作是 $A^T A$ 的特征向量, Σ^2 为特征值的平方。
- 2) $A = U\Sigma V^T$, 右乘 A^T , 有: $AA^T = U\Sigma V^T V\Sigma^T U^T = U\Sigma^T I\Sigma U^T = U\Sigma^T \Sigma U^T = U\Sigma^2 U^T$ 可以将 U 看作是 AA^T 的特征向量, Σ^2 为特征值的平方。

例1:

 $A = \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix}$, 计算矩阵 A 的 SVD 分解。

1) $A^{T}A = \begin{bmatrix} 25 & 7 \\ 7 & 25 \end{bmatrix}$, 可以计算出特征值分别为 32、18,特征向量分别为:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$
、 $\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$,化为单位向量为 $v_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$ 、 $v_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$, $\sigma_1 = 32$, $\sigma_2 = 18$

- 2) $AA^T = \begin{bmatrix} 32 & 0 \\ 0 & 18 \end{bmatrix}$,可以计算出特征值分别为 32、18,特征向量分别为: $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{。 但是我们不能直接使用这一组特征向量,因为 UV 必须满足式}$ 子 $AV = U\Sigma$ 。 $Av_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ -3\sqrt{2} \end{bmatrix}$,所以我们取 $u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 、 $u_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$ 。
- 3) 带入上面的结果:

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

当 A 中存在零空间和左零空间时:

 v_1 , v_2 ··· v_r 是行空间的一组标准基

 u_1 , u_2 ··· u_r 是列空间的一组标准基

 v_r , v_{r+1} ··· v_n 是零空间的一组基

 u_{r+1} , u_{r+1} ··· u_m 是左零空间的一组基