30. 奇异值分解

1. 之前的分解

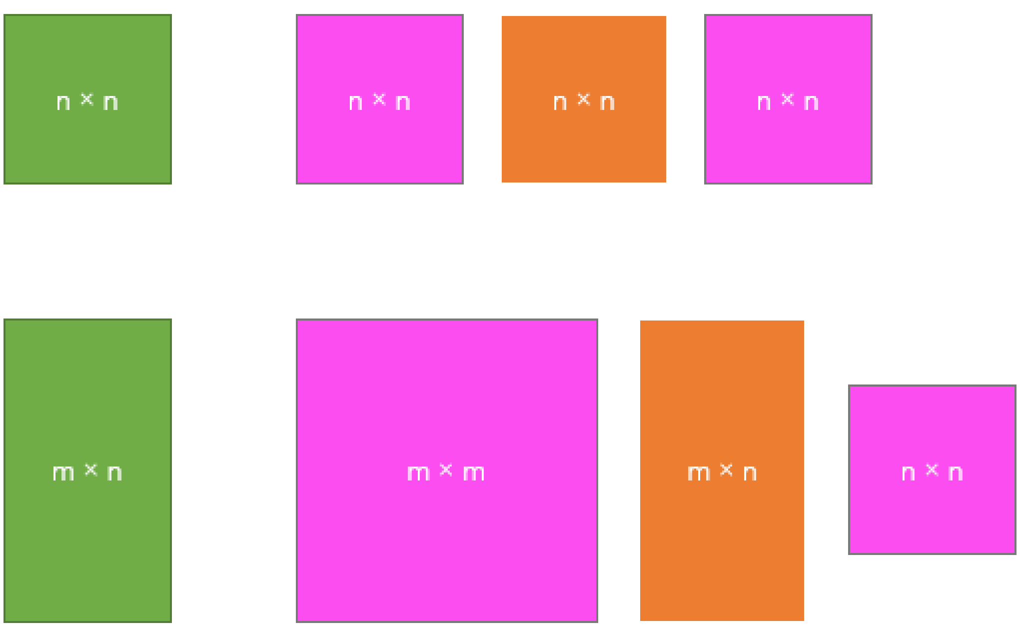
对于之前，我们已经有过各式各样的分解。
诸如 LU 分解（任意）、QR 分解（可逆）、对角化（方阵，n 个无关特征向量）、相似矩阵（方阵）、正定矩阵（对称）。

但是它们要么 **为了更好的分解形式** 有着或多或少的要求，要么由于 **分解形式不佳** 而相对不被重用。

还记得之前的对角化。
如果存在一个方阵 A，其拥有 n 个特征值 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$，那么或许本矩阵就有可能拥有 n 个线性无关的特征向量。
对于这些线性无关的特征向量，利用 **施密特正交化** 就可以做到让它们两两正交。
从而把 $A = S\Lambda S^{-1}$ 写作 $A = Q\Lambda Q^T$ 的形式。
而正定矩阵当中，各个特征值又都大于 0，所以 Λ 变成了一个对角元皆为正数的方阵。

不必说不拥有 n 个线性无关特征向量的矩阵了，对于那些非方阵的矩阵，都不能利用这种分解方法。
（**直至现在，矩阵如果有逆，其与逆都为方阵**）

2. SVD 的由来



（注：
粉色 代表 **正交矩阵** Q；
橙色 代表 **特征值相关的矩阵** $\Lambda\ or\ \Sigma$；
绿色 代表 **任意形状的矩阵** A）

上方是 $n \times n$，$m \times n$ 的矩阵，下方是任意大小的矩阵 $m \times n$。
根据矩阵乘法的性质，它们可以被分解为右边的三个矩阵相乘的形式。

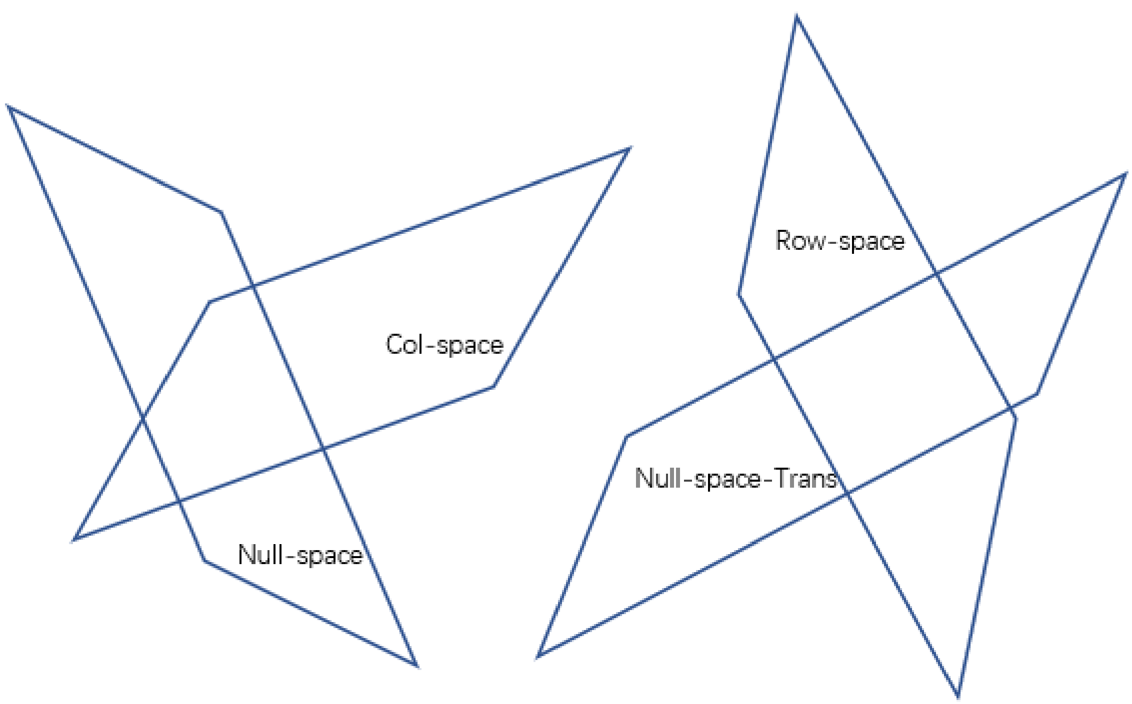
而上方的三个方阵形式，也就是代表着：$A = Q\Lambda Q^T$
这里的 Q 是正交矩阵，它完成了 **特征提取** 的工作。（只要是特征向量组就可以提取特征值，不过正交的最好）

那么大胆猜想（才疏学浅还不知动机所在），是不是任意一个矩阵都可以被分解成 **两个正交矩阵** 夹另一种 **与特征值相关** 的矩阵呢。
这或许就是 SVD 的出发点。因为如果可以做到，那么任意一个矩阵都可以被拆解。

3. 自基本子空间

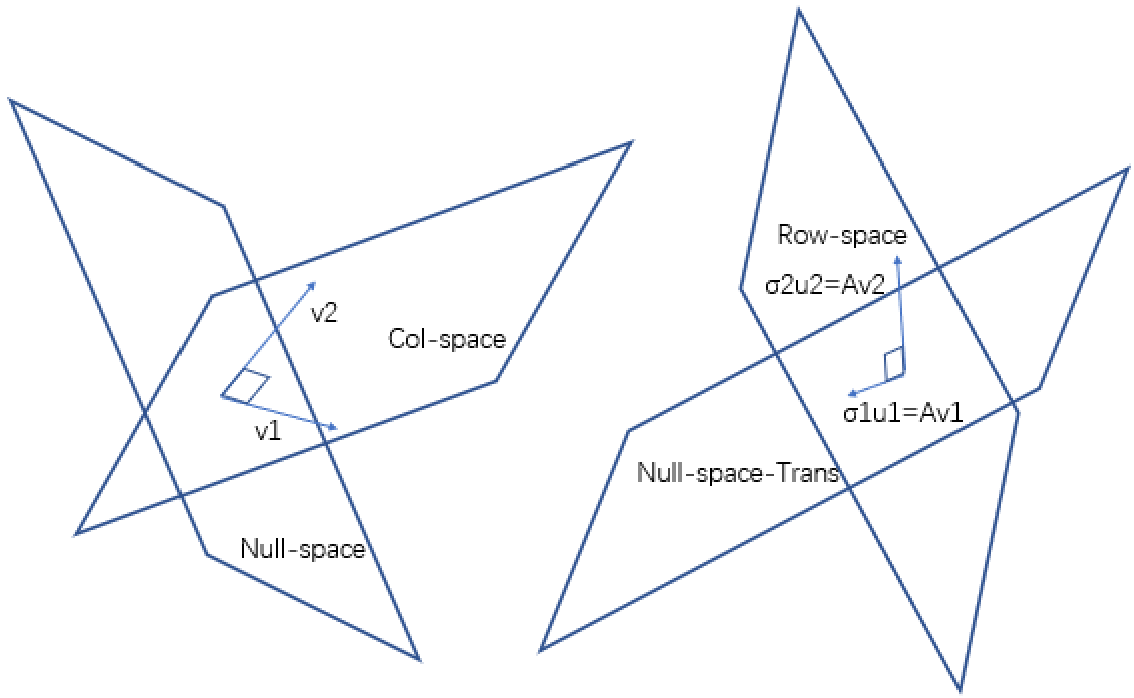
i. 子空间角度的推导

如果现在要寻找一个对于一般矩阵的分解。



对于一般的矩阵 A，其四个基本子空间的关系如上图所示。
（只表示垂直关系，并不意味相交了，可见两个空间没有交线）
如果我取 **行空间中的一个单位向量** v_1，令其经过某种变换 A 之后变为与 **列空间的单位向量** u_1 平

行 的向量 Av_1，其中有：$Av_1 = \sigma_1 u_1$。
同理，对于另外一个与 v_1 垂直的单位向量 v_2，做同样变换，得到与上面相似的结果。以此类推，得到 **一组行空间正交基**，在经过某种相同变换后，变成 **一组列空间正交基**。



上图可以表示为：

$$\begin{cases} Av_1 = \sigma_1 u_1 \\ Av_2 = \sigma_2 u_2 \\ \qquad \vdots \\ Av_n = \sigma_n u_n \end{cases}$$

转换为矩阵表达：

$$AV = U\Sigma$$

由于此处 U, V 都是正交矩阵，有：$UU^T = VV^T = I$，所以：

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

就把这种对于任意大小矩阵都成立的分解，叫做 SVD分解。
为了分解任意矩阵，要求的方阵就是 U, V。
对于矩阵 A，其转置 $A^T = V\Sigma^T U^T$。

所以：

$$
\begin{cases}
A^TA = V\Sigma^TU^TU\Sigma V^T = V(\Sigma^T\Sigma)V^T \\
\\
AA^T = U\Sigma V^TV\Sigma^TU^T = U(\Sigma\Sigma^T)U^T
\end{cases}
$$

对于中间的矩阵 Σ：

$$
\begin{bmatrix}
\sigma_1^2 & & & & & \\
& \sigma_2^2 & & & & \\
& & \ddots & & & \\
& & & \sigma_r^2 & & \\
& & & & \ddots & \\
& & & & & 0 \\
& & & & &
\end{bmatrix}
$$

（需要注意的是，这个矩阵不一定是一个方阵，其大小为 $m \times n$，r 为原被分解的矩阵 A 的秩。

1. 一旦 $r < n$，那么就会有 **全零列**；
2. 如果 $r < m$，就会有 **全零行**。

此矩阵表示的是 $r < m, r < n$ 的情形）
（更需要注意的是，这里有一个约定需要遵守：$\sigma_1 > \sigma_2 > \cdots > \sigma_r$）

ii. 计算原理

通过上面的式子，我们发现 $\Sigma\Sigma^T$ 或者是 $\Sigma^T\Sigma$，都是 **对角阵**。
并且 U, U^T, V, V^T 这 4 个方阵都是 **正交矩阵**。

所以这一组式子，很容易被理解成 AA^T, A^TA 为正定矩阵，计算 U 或者 V，就是在计算矩阵 AA^T 或者 A^TA 的 **正交特征向量组**：

$$
\begin{cases}
A^TA = V\Sigma^TU^TU\Sigma V^T = V(\Sigma^T\Sigma)V^T \\
\\
AA^T = U\Sigma V^TV\Sigma^TU^T = U(\Sigma\Sigma^T)U^T
\end{cases}
$$

上面一直都在强调 **或者** 二字，就是因为最好不要用两种方法分别求 U, V，因为这两个矩阵是通过等式 $AV = \Sigma V$ 关联起来的。