

SVD

问题引入

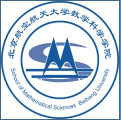
奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

# 奇异值分解

## Singular Value Decomposition



# 内容提要

SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

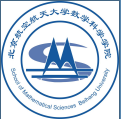
例子与应用

## 1 问题引入

## 2 奇异值分解定理

## 3 定理证明

## 4 例子与应用



SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

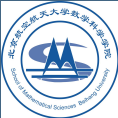
例子与应用

## 1 问题引入

## 2 奇异值分解定理

## 3 定理证明

## 4 例子与应用

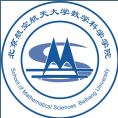


## 问题引入

- 方阵：特征分解。  
一个  $n$  阶可对角化方阵  $A$  可以分解为

$$A = P\Lambda P^{-1},$$

其中  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  是一个**对角阵**，对角元  $\lambda_i$  为  $A$  的特征值， $P$  由相应的特征向量  $\mathbf{v}_i$  组成。



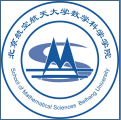
## 问题引入

- 方阵：特征分解。  
一个  $n$  阶可对角化方阵  $A$  可以分解为

$$A = P\Lambda P^{-1},$$

其中  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  是一个**对角阵**，对角元  $\lambda_i$  为  $A$  的特征值， $P$  由相应的特征向量  $\mathbf{v}_i$  组成。

- 问题：对于一个一般的  $m \times n$  的实矩阵，如何将其“对角化”？



SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

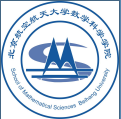
例子与应用

1 问题引入

2 奇异值分解定理

3 定理证明

4 例子与应用



SVD

# 奇异值分解定理

问题引入

奇异值分解定理

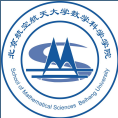
定理证明

例子与应用

## 奇异值分解定理, Theorem of Singular Value Decomposition

设  $M$  是一个  $m \times n$  的实矩阵, 则  $M$  有如下的所谓的奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD):

$$M = U\Sigma V^T = U \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ & & & 0 \end{pmatrix}_{m \times n} V^T,$$



SVD

# 奇异值分解定理

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

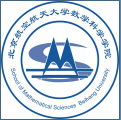
## 奇异值分解定理, Theorem of Singular Value Decomposition

设  $M$  是一个  $m \times n$  的实矩阵, 则  $M$  有如下的所谓的奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD):

$$M = U\Sigma V^T = U \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ & & & 0 \end{pmatrix}_{m \times n} V^T,$$

- $r = r(M)$ ,  $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$  被称为奇异值 (Singular Value)
- $U, V$  分别为  $m$  阶,  $n$  阶正交矩阵, 他们的前  $r$  列向量分别被称为左、右奇异向量 (Left-, Right-Singular Vector)。





SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

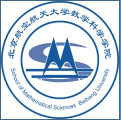
例子与应用

1 问题引入

2 奇异值分解定理

3 定理证明

4 例子与应用



SVD

# 奇异值分解定理证明

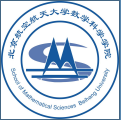
问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

## 关键点



SVD

# 奇异值分解定理证明

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

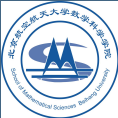
例子与应用

## 关键点

- 特征分解的特殊情况：当  $A$  是一个实对称方阵的时候，它正交相似于对角阵：

$$A = P\Lambda P^T,$$

其中  $P$  为正交阵。



# 奇异值分解定理证明

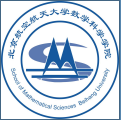
## 关键点

- 特征分解的特殊情况：当  $A$  是一个实对称方阵的时候，它正交相似于对角阵：

$$A = P\Lambda P^T,$$

其中  $P$  为正交阵。

- 若  $M$  为  $m \times n$  的实矩阵，则  $MM^T, M^TM$  分别为  $m$  阶与  $n$  阶实对称方阵。



SVD

# 奇异值分解定理证明

## 引理

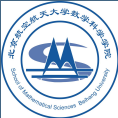
$MM^T$  与  $M^TM$  的特征值非负，且二者的正特征值之集相同。

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用



# 奇异值分解定理证明

## 引理

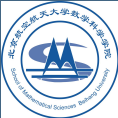
$MM^T$  与  $M^TM$  的特征值非负, 且二者的正特征值之集相同。

## 证明

任取  $MM^T$  的一个特征值  $\lambda$  以及相应的一个特征向量  $\mathbf{x}$ , 即有  $MM^T\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ 。那么  $\mathbf{x}^TMM^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\lambda\mathbf{x}$ , 即

$$\|M^T\mathbf{x}\|^2 = \lambda\|\mathbf{x}\|^2. \quad (1)$$

所以  $\lambda$  非负。同理  $M^TM$  的特征值也都是非负实数。



# 奇异值分解定理证明

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

## 引理

$MM^T$  与  $M^TM$  的特征值非负, 且二者的正特征值之集相同。

## 证明

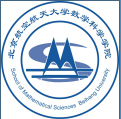
任取  $MM^T$  的一个特征值  $\lambda$  以及相应的一个特征向量  $\mathbf{x}$ , 即有  $MM^T\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ 。那么  $\mathbf{x}^TMM^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\lambda\mathbf{x}$ , 即

$$\|M^T\mathbf{x}\|^2 = \lambda\|\mathbf{x}\|^2. \quad (1)$$

所以  $\lambda$  非负。同理  $M^TM$  的特征值也都是非负实数。  
设  $\lambda > 0$ , 还是由  $MM^T\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ , 有

$$M^TMM^T\mathbf{x} = \lambda M^T\mathbf{x}, \quad (2)$$

又由(1)式知  $M^T\mathbf{x}$  非零向量, 故  $\lambda$  也是  $M^TM$  的正特征值。  $\square$



# 奇异值分解定理证明

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

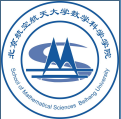
## 奇异值分解定理的证明

把  $MM^T$  与  $M^TM$  的正特征值记为  $\sigma_1^2 \geq \dots \geq \sigma_r^2 > 0$ , 其中  $\sigma_i > 0$ . 设  $M^TM$  通过  $n$  阶正交阵  $V = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$  对角化:

$$M^TM = V \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r^2 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}_n V^T.$$

有  $M^TM\mathbf{v}_i = \sigma_i^2\mathbf{v}_i$ , 令  $\mathbf{u}_i = \frac{M\mathbf{v}_i}{\sigma_i}$ , 那么可以证明:





# 奇异值分解定理证明

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

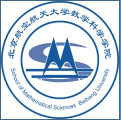
## 奇异值分解定理的证明

把  $MM^T$  与  $M^TM$  的正特征值记为  $\sigma_1^2 \geq \dots \geq \sigma_r^2 > 0$ , 其中  $\sigma_i > 0$ . 设  $M^TM$  通过  $n$  阶正交阵  $V = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$  对角化:

$$M^TM = V \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r^2 & \\ & & & 0 \end{pmatrix}_n V^T.$$

有  $M^TM\mathbf{v}_i = \sigma_i^2\mathbf{v}_i$ , 令  $\mathbf{u}_i = \frac{M\mathbf{v}_i}{\sigma_i}$ , 那么可以证明:

- 1  $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$  是  $m$  阶实对称阵  $MM^T$  的单位正交的特征向量;
- 2  $M\mathbf{v}_i = \sigma_i\mathbf{u}_i$ ,  $M^T\mathbf{u}_i = \sigma_i\mathbf{v}_i$ .



SVD

# 奇异值分解定理证明

问题引入

奇异值分解定理

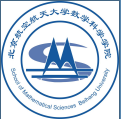
定理证明

例子与应用

## 奇异值分解定理的证明

于是有

$$M(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r) = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r) \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{pmatrix}.$$



# 奇异值分解定理证明

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

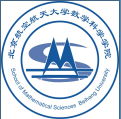
## 奇异值分解定理的证明

于是有

$$M(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r) = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r) \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{pmatrix}.$$

把  $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r\}$  扩充为  $\mathbb{R}^m$  的一组单位正交基  $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r, \mathbf{u}_{r+1}, \dots, \mathbf{u}_m\}$ , 那么我们就得到了 SVD 定理中的形式:

$$M = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m) \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \\ & & & 0 \end{pmatrix}_{m \times n} (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)^T.$$



# 奇异值分解定理

SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

## 奇异值分解的一种更紧凑的形式

将  $M = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m) \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r & 0 \end{pmatrix}_{m \times n} (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)^T$  写成分块形

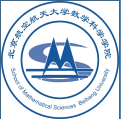
式

$$M = (U_1, U_2) \begin{pmatrix} \Sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \end{pmatrix} = U_1 \Sigma_0 V_1,$$

其中

$$U_1 = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r), \quad U_2 = (\mathbf{u}_{r+1}, \dots, \mathbf{u}_m);$$
$$V_1 = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r)^T, \quad V_2 = (\mathbf{v}_{r+1}, \dots, \mathbf{v}_n)^T;$$

$$\Sigma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{pmatrix}$$



SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

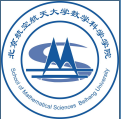
例子与应用

1 问题引入

2 奇异值分解定理

3 定理证明

4 例子与应用



SVD

问题引入

奇异值分解定理

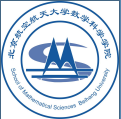
定理证明

例子与应用

# 奇异值分解例子

## 奇异值分解的例子

计算矩阵  $M = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$  的奇异值分解。



# 奇异值分解例子

## 奇异值分解的例子

计算矩阵  $M = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$  的奇异值分解。

解：有

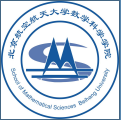
$$M^T M = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

于是有奇异值  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ . 我们可以选取

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

从而有

$$\mathbf{u}_1 = M\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = M\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$



# 奇异值分解例子

SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

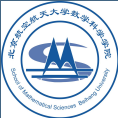
例子与应用

## 奇异值分解的例子（续）

于是  $M = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$  的奇异值分解可以是

$$M = U \Sigma V^T = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \cdot I_2 \cdot I_2.$$





# 奇异值分解例子

## 奇异值分解的例子（续）

于是  $M = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$  的奇异值分解可以是

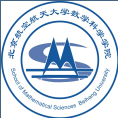
$$M = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \cdot I_2 \cdot I_2.$$

我们也可以另选

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -\sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix},$$

于是，相应的奇异值分解为

$$M = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} \cos(\theta + \alpha) & -\sin(\theta + \alpha) \\ \sin(\theta + \alpha) & \cos(\theta + \alpha) \end{pmatrix} \cdot I_2 \cdot \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$$



# 奇异值分解应用

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

## 奇异值分解的应用：图像压缩

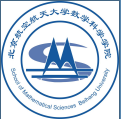
利用 SVD，我们可以把一个秩为  $r$  的  $m \times n$  矩阵  $M$  写作

$$M = \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \cdots + \sigma_r \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^T.$$

考虑  $M$  是一幅  $m \times n$  个像素的图片的情况。尽管图片一般接近满秩，但有效秩很低。也就是说，存在一个相对于  $r$  很小的  $k$ ，使得  $\sigma_{k+1}, \dots, \sigma_r$  非常小，接近于 0，因此用

$$M_k := \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \cdots + \sigma_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^T$$

可以很好地近似  $M$ ，同时只需要存储  $k(m+n+1)$  个数据，而不是原始的  $mn$  个数据。于是所需存储的数据大大减少，图像得到了压缩。



SVD

# 奇异值分解应用

问题引入

奇异值分解定理

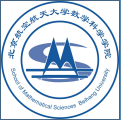
定理证明

例子与应用

## 奇异值分解的应用

SVD 的应用还包括

- 计算 Moore-Penrose 伪逆，进而求解最小二乘法问题；
- 数据集的主成分分析（Principal Components Analysis, PCA）；
- PageRank
- Eigenface
- . . . . .



# 奇异值分解应用

SVD

问题引入

奇异值分解定理

定理证明

例子与应用

## 奇异值分解的应用

SVD 的应用还包括

- 计算 Moore-Penrose 伪逆，进而求解最小二乘法问题；
- 数据集的主成分分析（Principal Components Analysis, PCA）；
- PageRank
- Eigenface
- . . . . .

还需要强调的是，计算机中 SVD 的实现，并不是按我们证明 SVD 定理中的步骤来的，而是用另外的快速的算法。（类似的还有线性代数中其他很多的计算）  
这里就不做讨论了。