奇异值分解 (SVD, Singular Value Decomposition)

张晓平

2018 年 11 月 26 日

武汉大学数学与统计学院

Table of contents

SVD 介绍

SVD 介绍

设 $\boldsymbol{A}$ 为 $m \times n$ 矩阵。$\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解 (Singular Value Decomposition) 为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{U}$ 为 $m \times m$ 的正交矩阵，$\boldsymbol{V}$ 为 $n \times n$ 的正交矩阵，Σ 为主对角元非负的 $m \times n$ 对角阵，其主对角元

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_p, \quad p \in \min\{m, n\}$$

称为 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值 (singular value)。

将 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 按列分块，即

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_n \end{pmatrix},$$

则

- 由 $\boldsymbol{V}$ 的正交性可知(1)可表示为

$$\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{U}\Sigma$$

即

$$\boldsymbol{A}\begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_m \end{pmatrix}\Sigma$$

亦即

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = \sigma_j \boldsymbol{u}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, p. \tag{2}$$

SVD 介绍

- 对(1)转置可得

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

利用 U 的正交性可得

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

即

$$A^T u_j = \sigma_j v_j, \quad j = 1, 2, \cdots, p. \tag{3}$$

- 对(1)转置可得
$$\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{V}\Sigma^T\boldsymbol{U}^T$$
利用 $\boldsymbol{U}$ 的正交性可得
$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{U} = \boldsymbol{V}\Sigma^T$$
即
$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{u}_j = \sigma_j\boldsymbol{v}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, p. \tag{3}$$

对(2)两端左乘 $\boldsymbol{A}^T$，再结合(3)可得

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = \sigma_j^2\boldsymbol{v}_j,$$

由此可知，$\boldsymbol{A}$ 的奇异值的平方为 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的特征值；同理可证

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{u}_j = \sigma_j^2\boldsymbol{u}_j.$$

SVD 算法

SVD 算法

显式对称 QR 方法

显式对称 QR 方法

一种计算 $\boldsymbol{A}$ 奇异值分解的方式是将对称 QR 算法应用于对称矩阵 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 以得到特征值分解 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\Sigma\Sigma^T\boldsymbol{V}^T$，然后利用关系式(2)来计算 $\boldsymbol{U}$。但该方式涉及到 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ 的计算，不实用。

SVD 算法

隐式对称 QR 方法

SVD 算法

可以考虑将对称 QR 方法隐式地应用于 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$。

SVD 算法

- 在特征值分解中，对称 QR 方法的第一步是利用 Householder 变换将矩阵约化为三对角形式;
- 而对于 SVD，我们可以利用 Householder 变换将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 约化为上两对角形式，即

$$\boldsymbol{U}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} d_1 & f_1 & & & \\ & d_2 & f_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & d_{n-1} & f_{n-1} \\ & & & & d_n \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

以 5×4 矩阵

$$A=\begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix}$$

为例，其具体过程如下:

1. 构造 $\boldsymbol{H}_1 = \begin{pmatrix} \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \end{pmatrix}$ 使得

$$\boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

2. 构造 $\boldsymbol{H}_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square \end{pmatrix}$ 使得

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}_2^T = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

3. 构造 $\boldsymbol{H}_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \square & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square & \square \end{pmatrix}$ 使得

$$\boldsymbol{H}_3 \boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{A} \boldsymbol{H}_2^T = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \square & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square & \square \\ & \square & \square & \square & \square \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & & \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \\ & * & * & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & \\ & * & * & * \\ & & * & * \\ & & * & * \\ & & * & * \end{pmatrix}$$

4. 构造 $\boldsymbol{H}_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \square & \square \\ & & \square & \square \end{pmatrix}$ 使得

$$\boldsymbol{H}_3 \boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{A} \boldsymbol{H}_2^T \boldsymbol{H}_4^T = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & * & \\ & & * & * & \\ & & * & * & \\ & & * & * & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \square & \square \\ & & \square & \square \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & \\ & * & * & \\ & & * & * \\ & & * & * \\ & & * & * \end{pmatrix}$$

5. 构造 $\boldsymbol{H}_5 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \square & \square & \square \\ & & \square & \square & \square \\ & & \square & \square & \square \end{pmatrix}$ 使得

$$\boldsymbol{H}_5 \boldsymbol{H}_3 \boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{A} \boldsymbol{H}_2 \boldsymbol{H}_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \square & \square & \square \\ & & \square & \square & \square \\ & & \square & \square & \square \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & * & * & \\ & & * & * & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & \\ & & & * & \end{pmatrix}$$

6. 构造 $\boldsymbol{H}_6 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \square & \square \\ & & & \square & \square \end{pmatrix}$ 使得

$$\boldsymbol{H}_6\boldsymbol{H}_5\boldsymbol{H}_3\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}_2^T\boldsymbol{H}_4^T = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \square & \square \\ & & & \square & \square \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & \\ & & & * & \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & \\ & & & & \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

记

$$\boldsymbol{U}_1^T = \boldsymbol{H}_6\boldsymbol{H}_5\boldsymbol{H}_3\boldsymbol{H}_1, \quad \boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{H}_2^T\boldsymbol{H}_4^T,$$

即

$$\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_3\boldsymbol{H}_5\boldsymbol{H}_6, \quad \boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_4$$

隐式对称 QR 方法

记

$$U_1^T = H_6 H_5 H_3 H_1, \quad V_1 = H_2^T H_4^T,$$

即

$$U_1 = H_1 H_3 H_5 H_6, \quad V_1 = H_2 H_4$$

注意：$T = B^T B = \begin{pmatrix} \triangle & \triangle & & & \\ \triangle & \triangle & \triangle & & \\ & \triangle & \triangle & \triangle & \\ & & \triangle & \triangle & \triangle \\ & & & \triangle & \triangle \end{pmatrix}$ 为对称的三对角阵。

隐式对称 QR 方法

由于 $\boldsymbol{T}$ 的计算量不大，我们可以将对称 QR 方法直接应用于 $\boldsymbol{T}$。但我们也可以通过在每一个迭代步执行以下步骤将对称 QR 方法隐式地用于 $\boldsymbol{T}$。

1. 对 $\boldsymbol{T}-\mu\boldsymbol{I}$(其中 μ 为 Wilkinson 位移) 确定 Givens 行旋转 $\boldsymbol{G}_1^T$，这只需计算 $\boldsymbol{T}$ 的第一列中的前两个元素 $t_{11}=d_1^2$ 和 $t_{21}=d_1f_1$。

$$\boldsymbol{G}_1^T(\boldsymbol{T}-\mu\boldsymbol{I})\boldsymbol{e}_1=\begin{pmatrix}\square & \square & & & \\ \square & \square & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\triangle-\mu \\ \triangle \\ 0 \\ 0 \\ 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}* \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0\end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

2. 将 $\boldsymbol{G}_1$ 作为列旋转作用到 $\boldsymbol{B}$ 的第一、二列得 $\boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{B}\boldsymbol{G}_1$

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{G}_1 = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & \\ & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Box & \Box & & & \\ \Box & \Box & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ + & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & \\ & & & & \end{pmatrix}$$

3. 构造 $\tilde{G}_1$ 使得

$$\tilde{G}_1^T B G_1 = \begin{pmatrix} \square & \square & & & \\ \square & \square & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & & \\ + & * & * & \\ & & * & * \\ & & & * \\ & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & + & \\ 0 & * & * & \\ & & * & * \\ & & & * \\ & & & \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

4. 构造 $\boldsymbol{G}_2$ 使得

$$\widetilde{\boldsymbol{G}}_1^T \boldsymbol{B} \boldsymbol{G}_1 \color{blue}{\boldsymbol{G}_2} \color{black} = \begin{pmatrix} * & * & \color{blue}{+} & \\ & * & * & \\ & & * & * \\ & & & * \end{pmatrix} \color{blue}{\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \square & \square & \\ & \square & \square & \\ & & & 1 \end{pmatrix}} \color{black} = \begin{pmatrix} * & * & \color{blue}{0} & \\ & * & * & \\ & \color{red}{+} & * & * \\ & & & * \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

5. 构造 $\widetilde{G}_2$ 使得

$$\widetilde{G}_2^T \widetilde{G}_1^T B G_1 G_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \square & \square & & \\ & \square & \square & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & + & * & * & \\ & & & * & \\ & & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & + & \\ & 0 & * & * & \\ & & & * & \\ & & & & \end{pmatrix}$$

6. 构造 $\boldsymbol{G}_3$ 使得

$$\widetilde{\boldsymbol{G}}_2^T \widetilde{\boldsymbol{G}}_1^T \boldsymbol{B} \boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{G}_2 \boldsymbol{G}_3 = \begin{pmatrix} * & * & & \\ & * & * & + \\ & & * & * \\ & & & * \\ & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \square & \square \\ & & \square & \square \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & \\ & * & * & 0 \\ & & * & * \\ & & + & * \\ & & & \end{pmatrix}$$

隐式对称 QR 方法

7. 构造 $\widetilde{G}_3$ 使得

$$
\widetilde{G}_3^T \widetilde{G}_2^T \widetilde{G}_1^T B G_1 G_2 G_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \square & \square & \\ & & \square & \square & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & + & * & \\ & & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ & * & * & & \\ & & * & * & \\ & & & * & \\ & & & & \end{pmatrix}
$$

综上，令 $\tilde{\boldsymbol{G}} = \tilde{\boldsymbol{G}}_1 \tilde{\boldsymbol{G}}_2 \tilde{\boldsymbol{G}}_3$ 和 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{G}_2 \boldsymbol{G}_3$，则

$$\tilde{\boldsymbol{G}}^T \boldsymbol{B} \boldsymbol{G} = \tilde{\boldsymbol{B}}$$

即

$$\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{T} \boldsymbol{G} = \boldsymbol{G}^T \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{B} \boldsymbol{G} = (\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{B}^T \tilde{\boldsymbol{G}})(\tilde{\boldsymbol{G}}^T \boldsymbol{B} \boldsymbol{G}) = \tilde{\boldsymbol{B}}^T \tilde{\boldsymbol{B}} = \tilde{\boldsymbol{T}}.$$

至此 $\boldsymbol{B}_6$ 又变成了上两对角矩阵，从而 $\tilde{\boldsymbol{T}}$ 为三对角阵。

SVD 的几何解释

SVD 的几何解释

线性变换的几何解释

SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$

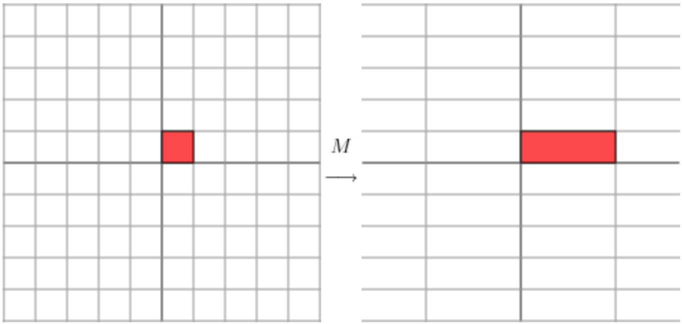


图 **1:** 对角阵

SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$

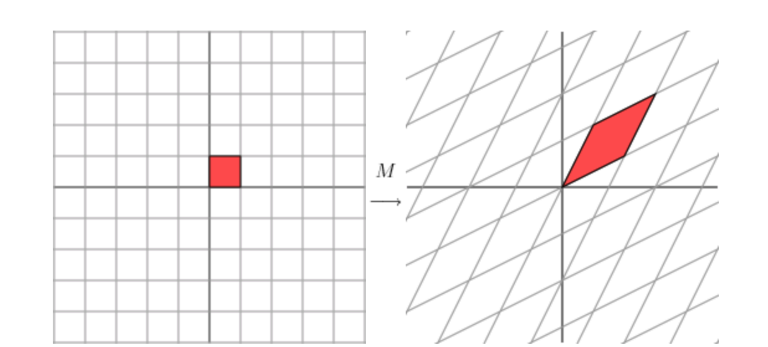
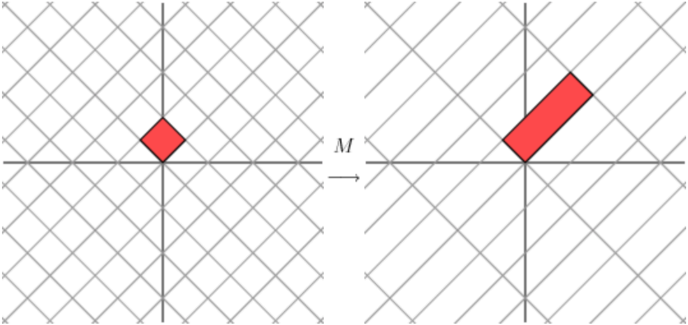


图 2: 对称矩阵：几何解释不直观

SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{MGx} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} & -\sin\frac{\pi}{4} \\ \sin\frac{\pi}{4} & \cos\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$



SVD 的几何解释

因 $\boldsymbol{M}$ 为对称矩阵，其特征值分解可表示为

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\Lambda, \quad \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} & -\sin\frac{\pi}{4} \\ \sin\frac{\pi}{4} & \cos\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} & -\sin\frac{\pi}{4} \\ \sin\frac{\pi}{4} & \cos\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

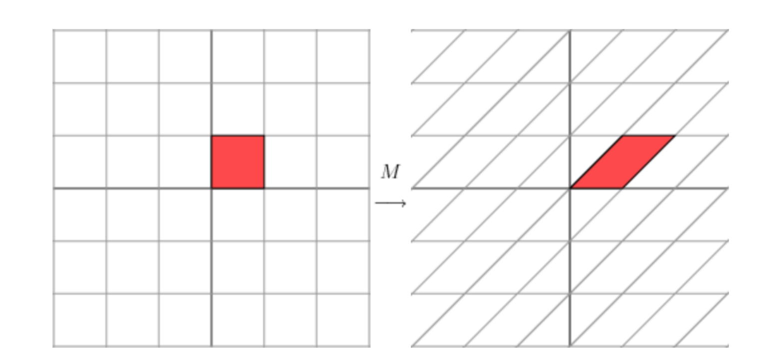
于是

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} & -\sin\frac{\pi}{4} \\ \sin\frac{\pi}{4} & \cos\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{4} & -\sin\frac{\pi}{4} \\ \sin\frac{\pi}{4} & \cos\frac{\pi}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{x}$$

这说明对 $\boldsymbol{x}$ 先逆时针旋转 $45°$，再左乘 $\boldsymbol{M}$，等价于：先对 $\boldsymbol{x}$ 沿横轴方向拉伸 3 倍，再逆时针旋转 $45°$。

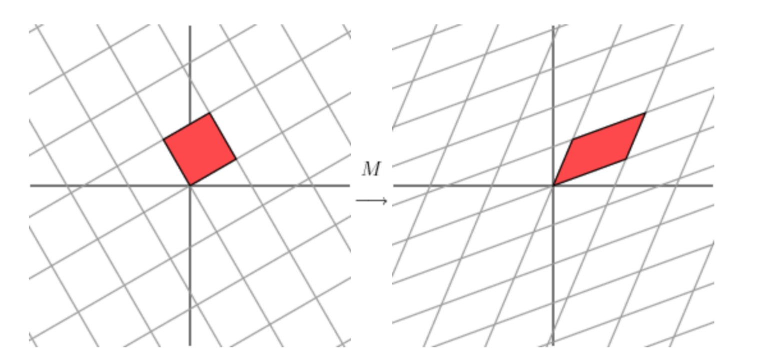
SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$



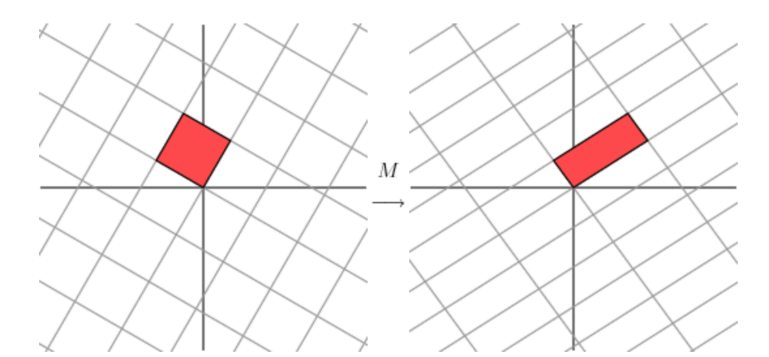
SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{MGx} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{6} & -\sin\frac{\pi}{6} \\ \sin\frac{\pi}{6} & \cos\frac{\pi}{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$



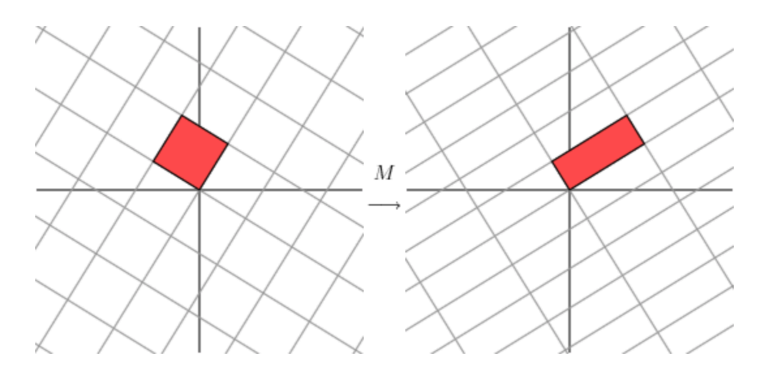
SVD 的几何解释

$$
\boldsymbol{MGx} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{3} & -\sin\frac{\pi}{3} \\ \sin\frac{\pi}{3} & \cos\frac{\pi}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}
$$



SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{MGx} = \boldsymbol{x}', \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos 58.28^\circ & -\sin 58.28^\circ \\ \sin 58.28^\circ & \cos 58.28^\circ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$



2×2 矩阵奇异值分解的几何解释为：对任何 2×2 矩阵，我们总是可以将一个正交网格变换到另一个正交网格。

SVD 的几何解释

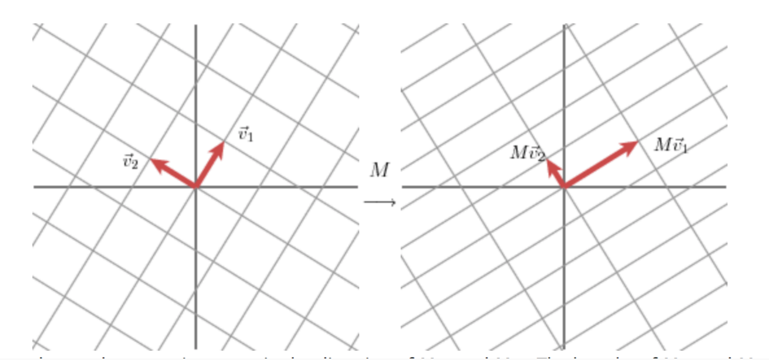
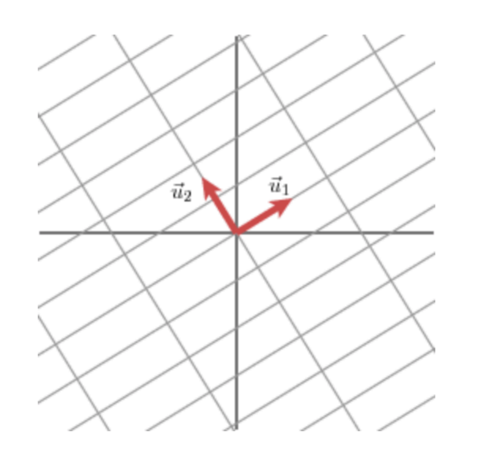


图 3: $\boldsymbol{v}_1 \perp \boldsymbol{v}_2, \|\boldsymbol{v}_1\| = \|\boldsymbol{v}_2\| = 1$， $\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_1 \perp \boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_2$

SVD 的几何解释



记 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2$ 分别为 $\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_2$ 方向的单位向量，$\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_2$ 的长度 σ_1, σ_2 称为 $\boldsymbol{M}$ 的奇异值。

SVD 的几何解释

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_1 = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1$$
$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_2 = \sigma_2 \boldsymbol{u}_2.$$

因 $\boldsymbol{v}_1 \perp \boldsymbol{v}_2$，故 $\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{v}_1^T \boldsymbol{x})\boldsymbol{v}_1 + (\boldsymbol{v}_2^T \boldsymbol{x})\boldsymbol{v}_2$$

从而有

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{v}_1^T \boldsymbol{x})\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_1 + (\boldsymbol{v}_2^T \boldsymbol{x})\boldsymbol{M}\boldsymbol{v}_2$$

即

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{v}_1^T \boldsymbol{x})\sigma_1 \boldsymbol{u}_1 + (\boldsymbol{v}_2^T \boldsymbol{x})\sigma_2 \boldsymbol{u}_2$$

亦即

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}_1 \sigma_1 \boldsymbol{v}_1^T \boldsymbol{x} + \boldsymbol{u}_2 \sigma_2 \boldsymbol{v}_2^T \boldsymbol{x}$$

由 $\boldsymbol{x}$ 的任意性可知

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{u}_1 \sigma_1 \boldsymbol{v}_1^T + \boldsymbol{u}_2 \sigma_2 \boldsymbol{v}_2^T$$

此即

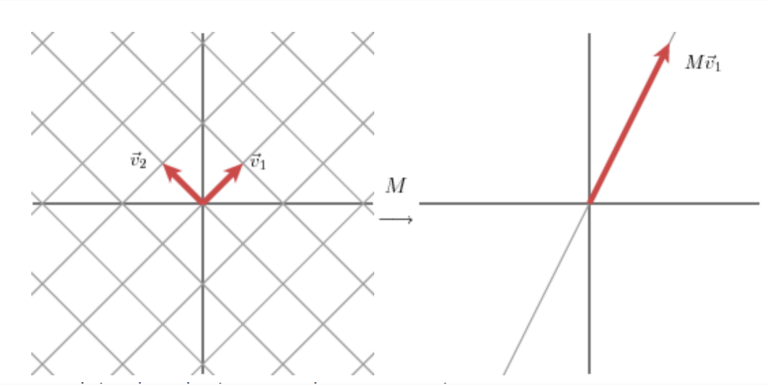
$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^T.$$

SVD 的几何解释

This shows how to decompose the matrix $\boldsymbol{M}$ into the product of three matrices: $\boldsymbol{V}$ describes an orthonormal basis in the domain, and $\boldsymbol{U}$ describes an orthonormal basis in the co-domain, and Σ describes how much the vectors in $\boldsymbol{V}$ are stretched to give the vectors in $\boldsymbol{U}$.

SVD 的几何解释

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}, \quad M = u_1 \sigma_1 v_1^T.$$



应用

应用

数据压缩

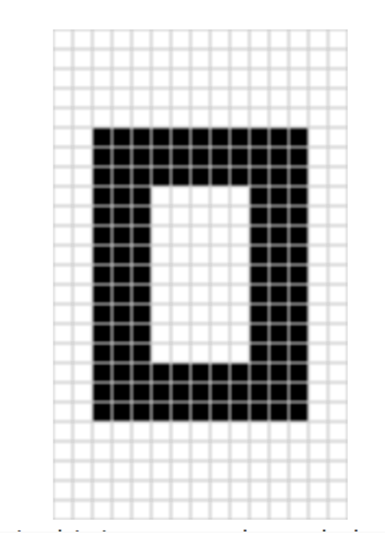


图 4: 15×25 grey image

数据压缩

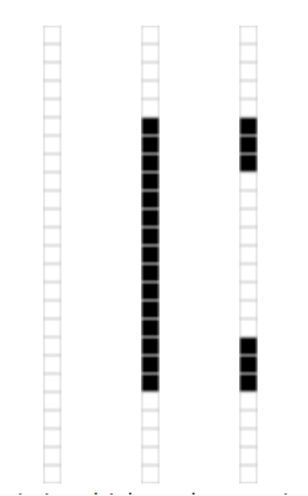


图 **5:** Only three types of columns in this image

数据压缩

$$
M = \begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1
\end{bmatrix}
$$

数据压缩

通过计算可发现 $\boldsymbol{M}$ 仅有 3 个非零奇异值，即

$$\sigma_1 = 14.72, \quad \sigma_2 = 5.22, \quad \sigma_3 = 3.31.$$

故 $\boldsymbol{M}$ 的奇异值分解可表示为

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{u}_1 \sigma_1 \boldsymbol{v}_1^T + \boldsymbol{u}_2 \sigma_2 \boldsymbol{v}_2^T + \boldsymbol{u}_3 \sigma_3 \boldsymbol{v}_3^T.$$

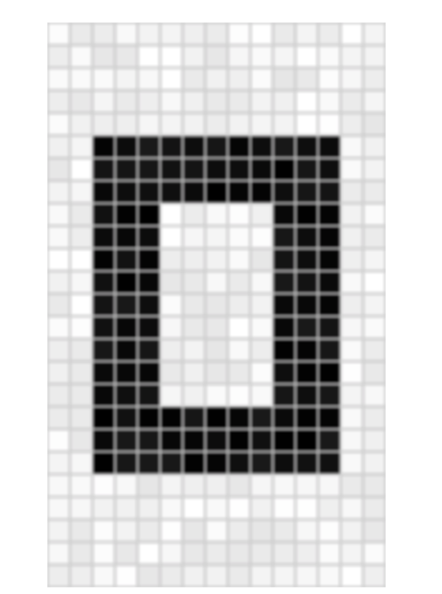
表示矩阵时，

- 原形式需要保存 375 个元素
- SVD 只需保存 $3 \times 15 + 3 \times 25 + 3 = 123$ 个元素

也就是说，奇异值分解可消除矩阵中的冗余。

减燥

数据压缩



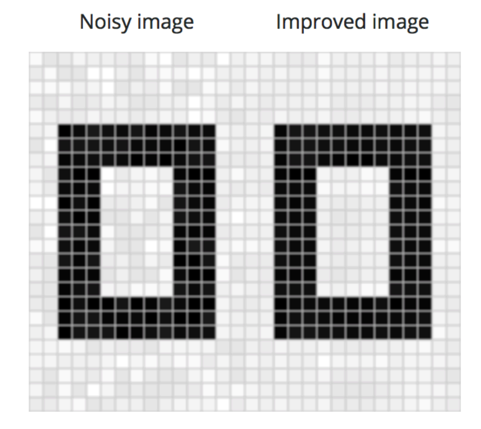
数据压缩

通过计算可发现 $\boldsymbol{M}$ 仅有 3 个非零奇异值，即

$$
\begin{aligned}
\sigma_1 &= 14.15 \\
\sigma_2 &= 4.67 \\
\sigma_3 &= 3.00 \\
\sigma_4 &= 0.21 \\
\sigma_5 &= 0.19 \\
&\vdots \\
\sigma_{15} &= 0.05
\end{aligned}
$$

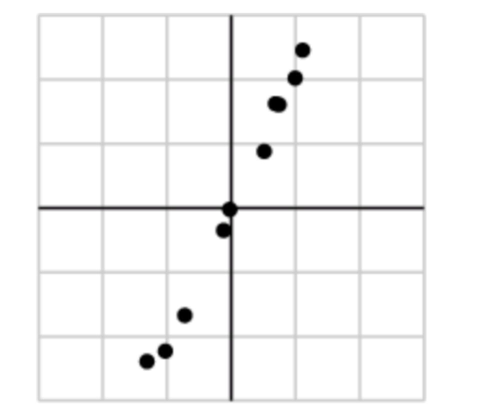
数据压缩

$$M \approx \boldsymbol{u}_1\sigma_1\boldsymbol{v}_1^T + \boldsymbol{u}_2\sigma_2\boldsymbol{v}_2^T + \boldsymbol{u}_3\sigma_3\boldsymbol{v}_3^T.$$



减燥

数据分析



$$\begin{pmatrix} -1.03 & 0.74 & -0.02 & 0.51 & -1.31 & 0.99 & 0.69 & -0.12 & -0.72 & 1.11 \\ -2.23 & 1.61 & -0.02 & 0.88 & -2.39 & 2.02 & 1.62 & -0.35 & -1.67 & 2.46 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_1 = 6.04, \quad \sigma_2 = 0.22$$

数据分析