矩阵分解之奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD)

Jingbo Xia

Huazhong Agricultural University

xiajingbo.math@gmail.com

20260113——人工智能2301/02

开宗明义 I

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。

开宗明义 II

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。
- 矩阵分解的目的之一是把放置在矩阵中的数据进行低秩逼近——可用以进行数据压缩；可用以消除数据稀疏性。

开宗明义 III

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。
- 矩阵分解的目的之一是把放置在矩阵中的数据进行低秩逼近——可用以进行数据压缩；可用以消除数据稀疏性。
- SVD是一个知名的矩阵分解算法，该算法的自然应用是衍生到推荐系统，也可以是NLP领域的潜在语义分析。

开宗明义 IV

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。
- 矩阵分解的目的之一是把放置在矩阵中的数据进行低秩逼近——可用以进行数据压缩；可用以消除数据稀疏性。
- SVD是一个知名的矩阵分解算法，该算法的自然应用是衍生到推荐系统，也可以是NLP领域的潜在语义分析。
- PCA同样是对存储在数据中的矩阵进行操作。我们介绍该算法的两个应用——第一是数据的降维，第二是数据的重构。

开宗明义 V

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。
- 矩阵分解的目的之一是把放置在矩阵中的数据进行低秩逼近——可用以进行数据压缩；可用以消除数据稀疏性。
- SVD是一个知名的矩阵分解算法，该算法的自然应用是衍生到推荐系统，也可以是NLP领域的潜在语义分析。
- PCA同样是对存储在数据中的矩阵进行操作。我们介绍该算法的两个应用——第一是数据的降维，第二是数据的重构。
- 这个教学材料中包括一个图片处理的示例，它能帮助同学们较为生动地理解PCA算法中的“维”。

开宗明义 VI

- 对矩阵的操作必要性在于数据本身的矩阵存储形式。
- 矩阵分解的目的之一是把放置在矩阵中的数据进行低秩逼近——可用以进行数据压缩；可用以消除数据稀疏性。
- SVD是一个知名的矩阵分解算法，该算法的自然应用是衍生到推荐系统，也可以是NLP领域的潜在语义分析。
- PCA同样是对存储在数据中的矩阵进行操作。我们介绍该算法的两个应用——第一是数据的降维，第二是数据的重构。
- 这个教学材料中包括一个图片处理的示例，它能帮助同学们较为生动地理解PCA算法中的“维”。
- 最后，为什么要把SVD和PCA放在一起讲授呢？难道仅仅因为它们都同时是在对矩阵类型的数据进行算法处理吗？

Table of contents I

Outline

1 奇异值分解/Singular Value Decomposition 9
- SVD定理 10
- SVD定理的证明 15
- 习题演算 32

2 SVD算法应用 45

奇异值分解/Singular Value Decomposition I

SVD定理

SVD 是一个知名的矩阵算法，广泛地（并不限定于）应用于以下场景

- Image compression（图像压缩），
- Matrix completion（矩阵补全），
- Recommendation system（推荐系统），
- Latent semantic index (有时候被称作Latent semantic analysis，潜在语义分析),
- ...

奇异值分解/Singular Value Decomposition II

SVD定理

定理 (奇异值分解)

对于一个秩为 r 的 $m \times n$ 矩阵 A，存在如下分解：

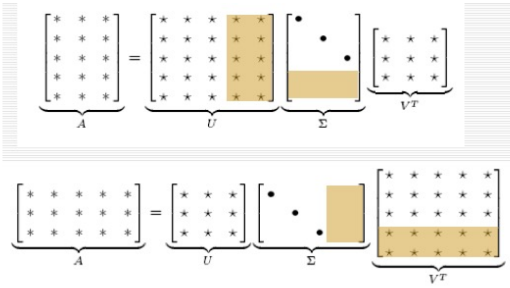
$$A = U\Sigma V^T,$$

其中

- U 和 V 是正交矩阵；U 称为左奇异向量，其列向量是 AA^T 的特征向量，V称为右奇异向量，其列向量是 A^TA 的特征向量。
- $\Sigma = \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, 被称为奇异值矩阵；
- $\Delta = diag(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$,
- $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$（被称为矩阵 A 的奇异值，按降序排列，它们衡量了矩阵在对应方向上的“伸缩”程度。），$i = 1, 2, \cdots, r$，$r = Rank(A)$，
- λ_i 是 AA^T 的特征值。

奇异值分解/Singular Value Decomposition III
SVD定理

为了更好地理解，这里以一个 5×3 的矩阵 A 为例：



我们将上述公式改写为：

$$A = (A_1, A_2, A_3) = (U_1, \cdots, U_5) \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1^T \\ V_2^T \\ V_3^T \end{pmatrix},$$

奇异值分解/Singular Value Decomposition IV
SVD定理

其中 A_i 是矩阵 A 的第 i 列，U_k 是矩阵 U 的第 k 列，而 V_j 是矩阵 V 的第 j 列。
通过直接计算可以得出：

$$A = \sigma_1 U_1 V_1^T + \sigma_2 U_2 V_2^T + \sigma_3 U_3 V_3^T.$$

因此，$\sigma_1 U_1 V_1^T + \sigma_2 U_2 V_2^T$ 被称为矩阵 A 的低秩逼近（low-rank approximation）。
一般而言，$\sum_{i=1}^{R} \sigma_i U_i V_i^T$ 是任意矩阵 A 的一个秩为 R 的逼近。

奇异值分解/Singular Value Decomposition V
SVD定理

总结：

列向量表示：
公式 $A = \sum \sigma_i U_i V_i^T$ 展示了 SVD 的另一种视角——将矩阵分解为若干个秩为 1 的矩阵（外积）之和。

数据压缩：
在实际应用中（如图像压缩），如果奇异值 σ_i 衰减很快，我们只需保留前 R 个较大的奇异值及其对应的向量，就能以极小的数据量还原出矩阵的主要特征。

奇异值分解/Singular Value Decomposition I

SVD定理的证明–引理准备

引理 1.
假设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$，则 A^TA 和 AA^T 的特征值均为非负的。

奇异值分解/Singular Value Decomposition II

SVD定理的证明–引理准备

引理 1.
假设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$，则 A^TA 和 AA^T 的特征值均为非负的。

证明：假设 λ 是 A^TA 的特征值，x 是其对应的特征向量，
则我们有

$$A^TAx = \lambda x.$$

由于 A^TA 是对称的，因此 λ 是一个实数，且我们有

$$0 \le (Ax, Ax) = (Ax)^T(Ax) = x^TA^TAx = x^T(\lambda x) = \lambda x^Tx.$$

因为 $x^Tx > 0$，所以我们得出 $\lambda \ge 0$。
同理，可知 AA^T 的特征值也是非负的。 $\square$

奇异值分解/Singular Value Decomposition III

SVD定理的证明–引理准备

引理 2.
假设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则有 $r(A) = r(A^TA) = r(AA^T)$。

奇异值分解/Singular Value Decomposition IV

SVD定理的证明–引理准备

引理 2.
假设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则有 $r(A) = r(A^TA) = r(AA^T)$。

证明：
我们通过证明齐次线性方程组 $Ax = 0$ 与 $A^TAx = 0$ 具有完全相同的解集来推导此结论。

(i) 证明"若 $Ax = 0$，则 $A^TAx = 0$"。
若 x 满足 $Ax = 0$，我们在等式两边同时左乘 A^T：

$$A^T(Ax) = A^T(0) \implies A^TAx = 0$$

这说明 $Ax = 0$ 的每一个解都是 $A^TAx = 0$ 的解。

(ii)证明"若 $A^TAx = 0$，则 $Ax = 0$"。

奇异值分解/Singular Value Decomposition V
SVD定理的证明–引理准备

若 x 满足 $A^TAx=0$，我们在等式两边同时左乘 x^T：

$$x^T(A^TAx)=x^T(0) \implies (Ax)^T(Ax)=0$$

根据向量内积的性质，$(Ax)^T(Ax)=\|Ax\|_2^2$。若向量长度的平方为 0，则该向量本身必须为零向量：

$$\|Ax\|_2^2=0 \implies Ax=0$$

这说明 $A^TAx=0$ 的每一个解也都是 $Ax=0$ 的解。

(iii) 既然 $Ax=0$ 与 $A^TAx=0$ 的解空间完全相同，它们的维数必定相等：

$$n-r(A)=n-r(A^TA),$$

奇异值分解/Singular Value Decomposition VI
SVD定理的证明–引理准备

因此，$r(A)=r(A^TA)$。

(iv) 同理可证 $r(A)=r(AA^T)$。
对 A^T 应用上述结论，有 $r(A^T)=r((A^T)^TA^T)=r(AA^T)$。由于矩阵与其转置的秩相等（$r(A)=r(A^T)$），故：

$$r(A)=r(A^TA)=r(AA^T) \quad \square$$

奇异值分解/Singular Value Decomposition VII

SVD定理的证明–引理准备

引理 3:
假设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 AA^T 和 A^TA 具有相同的特征值（非零特征值）。

奇异值分解/Singular Value Decomposition VIII

SVD定理的证明–引理准备

引理 3:
假设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，则 AA^T 和 A^TA 具有相同的特征值（非零特征值）。

证明:
假设 λ 是 A^TA 的一个特征值，则有 $A^TAx = \lambda x$（其中 $x \neq 0$）。
在等式两边同时左乘矩阵 A，等式变为:

$$A(A^TAx) = A(\lambda x) \implies (AA^T)(Ax) = \lambda(Ax)$$

由此可知，若 $Ax \neq 0$，则 λ 也是 AA^T 的一个特征值，其对应的特征向量为 Ax。
同理可知，AA^T 的特征值也是 A^TA 的特征值。
以上两点陈述足以证明本引理（对于非零特征值的情况）。 $\square$

奇异值分解/Singular Value Decomposition IX

SVD定理的证明–引理准备

引理 4:
如果两个矩阵彼此正交等价（Orthogonally equivalent），则它们具有相同的奇异值。

奇异值分解/Singular Value Decomposition X

SVD定理的证明–引理准备

引理 4:
如果两个矩阵彼此正交等价（Orthogonally equivalent），则它们具有相同的奇异值。

证明： 假 $A, B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 正交等价，则存在正交矩阵 $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 和 $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$，使得 $A = UBV$。
直接计算知，

$$A^TA = (UBV)^T(UBV) = V^TB^TU^TUBV = V^TB^TBV.$$

由于 V 是正交矩阵，则有 $V^T = V^{-1}$，故

$$A^TA = V^{-1}B^TBV.$$

所以 A^TA 与 B^TB 相似，因此它们具有相同的特征值，以及相同的奇异值。
$\square$

奇异值分解/Singular Value Decomposition I

SVD定理的证明–主定理的证明

[Singular Value Decomposition]
对于一个秩为 r 的 $m \times n$ 矩阵 A，存在如下分解：

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

其中

- U 和 V 是正交矩阵；U 称为左奇异向量，其列向量是 AA^T 的特征向量，V称为右奇异向量，其列向量是 A^TA 的特征向量。
- $\Sigma = \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，被称为奇异值矩阵；
- $\Delta = diag(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$，
- $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$（被称为矩阵 A 的奇异值，按降序排列，它们衡量了矩阵在对应方向上的“伸缩”程度。），$i = 1, 2, \cdots, r$，$r = Rank(A)$，
- λ_i 是 AA^T 的特征值。

奇异值分解/Singular Value Decomposition II

SVD定理的证明–主定理的证明

证明：由于 A^TA 实对称，所以存在一个正交矩阵 V（其秩为 r），使得

$$V^T(A^TA)V = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

此处 $\Delta = \text{diag}(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$，且 $\sigma_i^2 = \lambda_i$（λ_i 为 A^TA 的特征值）。

注：请回忆如何使用施密特正交化，将一个方阵正交对角化。另外一个需要留意的结论：实对称矩阵永可对角化。

奇异值分解/Singular Value Decomposition III

SVD定理的证明–主定理的证明

证明：由于 A^TA 实对称，所以存在一个正交矩阵 V（其秩为 r），使得

$$V^T(A^TA)V = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

此处 $\Delta = \mathrm{diag}(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$，且 $\sigma_i^2 = \lambda_i$（λ_i 为 A^TA 的特征值）。
对 V 进行分块，我们有：

$$V = (V_1, V_2),$$

其中 V_1 由 V 的前 r 列组成。

> 注：此处 V 的矩阵分块方式是一个技巧。

奇异值分解/Singular Value Decomposition IV

SVD定理的证明–主定理的证明

证明：由于 A^TA 实对称，所以存在一个正交矩阵 V（其秩为 r），使得

$$V^T(A^TA)V = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

此处 $\Delta = \mathrm{diag}(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$，且 $\sigma_i^2 = \lambda_i$（λ_i 为 A^TA 的特征值）。
对 V 进行分块，我们有：

$$V = (V_1, V_2),$$

其中 V_1 由 V 的前 r 列组成。把结果代回上式，有

$$\begin{pmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{pmatrix}(A^TA)(V_1, V_2) = \begin{pmatrix} V_1^TA^TAV_1 & * \\ * & V_2^TA^TAV_2 \end{pmatrix}. = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{pmatrix}(A^TA)(V_1,V_2)=\begin{pmatrix} V_1^TA^TAV_1 & * \\ * & V_2^TA^TAV_2 \end{pmatrix} \cdot = \begin{pmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

通过比较左右两端，我们得出：

$$V_2^TA^TAV_2=(AV_2)^T(AV_2)=0.$$

由此可得 $AV_2=0$。
此外，我们还可知：

$$V_1^TA^TAV_1=(AV_1)^T(AV_1)=\Delta^2.$$

为了记号的简洁，我们令 $U_1=AV_1\Delta^{-1}$。直接验证，知

$$U_1^TU_1=(\Delta^{-1}V_1^TA^T)(AV_1\Delta^{-1})=\Delta^{-1}(V_1^TA^TAV_1)\Delta^{-1}=\Delta^{-1}\Delta^2\Delta^{-1}=E_r.$$

这说明 U 的前 r 列（即构成的 U_1）是正交单位向量。
因此，我们可以通过 $U_2\in\mathbb{R}^{m\times(m-r)}$ 对 U_1 进行扩充，从而构造出一个正交矩阵 $U=(U_1,U_2)$。

注：我们永可这样做——首先扩充 r 个线性无关的向量到一个包含 m个向量的无关组，其次用施密特正交变换和单位化后，这 m 个正交单位向量则组合成一个正交矩阵。

由此，我们已得到 V、Σ（即中间的对角阵）和 U。

由此，我们已得到 V、Σ（即中间的对角阵）和 U。下面将其代入SVD的矩阵分解结果，予以验证：

$$U^TAV = \begin{pmatrix} U_1^T \\ U_2^T \end{pmatrix} A(V_1, V_2) = \begin{pmatrix} U_1^TAV_1 & U_1^TAV_2 \\ U_2^TAV_1 & U_2^TAV_2 \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} U_1^TU_1\Delta & U_1^T(AV_2) \\ U_2^TU_1\Delta & U_2^T(AV_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

因为 $U_2^TU_1 = 0$（由于 U 的正交性）且 $AV_2 = 0$。

综上所述，定理得证。 $\square$

Singular Vector Decomposition I

习题演算

例题

请计算矩阵A的SVD分解。其中 $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Singular Vector Decomposition II

习题演算

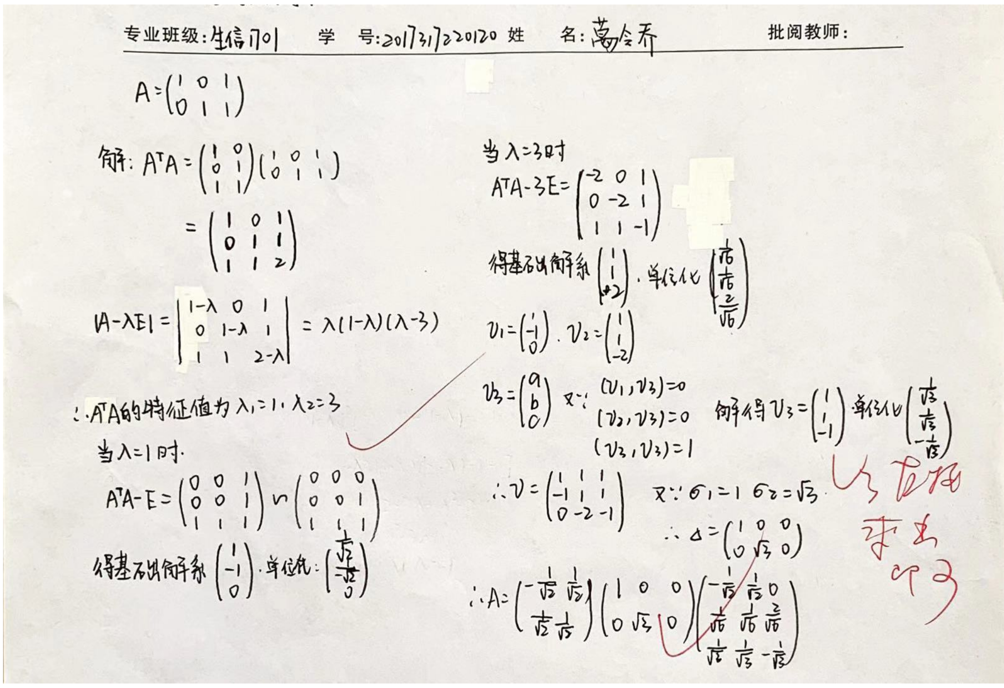
例题

请计算矩阵A的SVD分解。其中 $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$.

【答案】

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}.$$

历史作业



专业班级:生信1701 学 号:2017317220120 姓 名:葛今乔 批阅教师:

$$A=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}$$

解: $A^TA=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&1&2\end{pmatrix}$

$$|A-\lambda E|=\begin{vmatrix}1-\lambda&0&1\\0&1-\lambda&1\\1&1&2-\lambda\end{vmatrix}=\lambda(1-\lambda)(\lambda-3)$$

$\therefore A^TA$的特征值为 $\lambda_1=1,\ \lambda_2=3$

当 $\lambda=1$ 时.

$$A^TA-E=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&1\\1&1&1\end{pmatrix}\sim\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\1&1&1\end{pmatrix}$$

得基础解系 $\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}$. 单位化: $\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}\\-\frac{1}{\sqrt2}\\0\end{pmatrix}$

当 $\lambda=3$ 时

$$A^TA-3E=\begin{pmatrix}-2&0&1\\0&-2&1\\1&1&-1\end{pmatrix}$$

得基础解系 $\begin{pmatrix}1\\1\\+2\end{pmatrix}$. 单位化 $\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt6}\\\frac{1}{\sqrt6}\\\frac{2}{\sqrt6}\end{pmatrix}$

$v_1=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}$. $v_2=\begin{pmatrix}1\\1\\-2\end{pmatrix}$

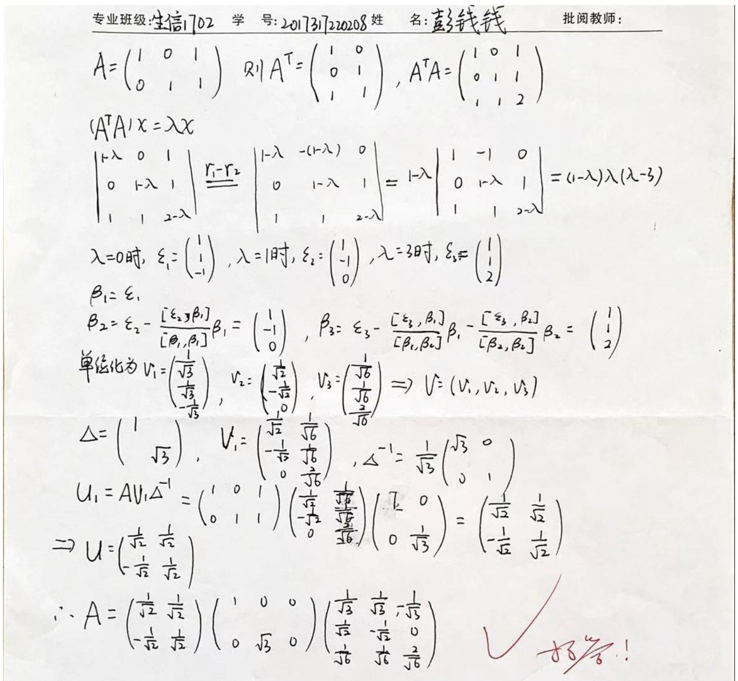
$v_3=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$ 又$\because$ $(v_1,v_3)=0$, $(v_2,v_3)=0$, $(v_3,v_3)=1$ 解得 $v_3=\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}$ 单位化 $\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt3}\\\frac{1}{\sqrt3}\\-\frac{1}{\sqrt3}\end{pmatrix}$

$\therefore V=\begin{pmatrix}1&1&1\\-1&1&1\\0&-2&-1\end{pmatrix}$ 又$\because \sigma_1=1\ \sigma_2=\sqrt3$

$\therefore \Delta=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\sqrt3&0\end{pmatrix}$

$$\therefore A=\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\\\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\sqrt3&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}&0\\\frac{1}{\sqrt6}&\frac{1}{\sqrt6}&\frac{2}{\sqrt6}\\\frac{1}{\sqrt3}&\frac{1}{\sqrt3}&-\frac{1}{\sqrt3}\end{pmatrix}$$

历史作业



专业班级:生信1702 学 号:2017317220208 姓 名:彭钱钱 批阅教师:

$A=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}$ 则 $A^T=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\1&1\end{pmatrix}$, $A^TA=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&1&2\end{pmatrix}$

$(A^TA)x=\lambda x$

$$\begin{vmatrix}1-\lambda&0&1\\0&1-\lambda&1\\1&1&2-\lambda\end{vmatrix}\xlongequal{r_1-r_2}\begin{vmatrix}1-\lambda&-(1-\lambda)&0\\0&1-\lambda&1\\1&1&2-\lambda\end{vmatrix}=1-\lambda\begin{vmatrix}1&-1&0\\0&1-\lambda&1\\1&1&2-\lambda\end{vmatrix}=(1-\lambda)\lambda(\lambda-3)$$

$\lambda=0$时, $\varepsilon_1=\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}$, $\lambda=1$时, $\varepsilon_2=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}$, $\lambda=3$时, $\varepsilon_3=\begin{pmatrix}1\\1\\2\end{pmatrix}$

$\beta_1=\varepsilon_1$

$\beta_2=\varepsilon_2-\frac{[\varepsilon_2,\beta_1]}{[\beta_1,\beta_1]}\beta_1=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}$, $\beta_3=\varepsilon_3-\frac{[\varepsilon_3,\beta_1]}{[\beta_1,\beta_1]}\beta_1-\frac{[\varepsilon_3,\beta_2]}{[\beta_2,\beta_2]}\beta_2=\begin{pmatrix}1\\1\\2\end{pmatrix}$

单位化为 $V_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt3}\\\frac{1}{\sqrt3}\\-\frac{1}{\sqrt3}\end{pmatrix}$, $V_2=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}\\-\frac{1}{\sqrt2}\\0\end{pmatrix}$, $V_3=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt6}\\\frac{1}{\sqrt6}\\\frac{2}{\sqrt6}\end{pmatrix}\Rightarrow V=(V_1,V_2,V_3)$

$\Delta=\begin{pmatrix}1&\\&\sqrt3\end{pmatrix}$, $V_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt6}\\-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt6}\\0&\frac{2}{\sqrt6}\end{pmatrix}$, $\Delta^{-1}=\frac{1}{\sqrt3}\begin{pmatrix}\sqrt3&0\\0&1\end{pmatrix}$

$U_1=AV_1\Delta^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt6}\\-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt6}\\0&\frac{2}{\sqrt6}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&\frac{1}{\sqrt3}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\\-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}$

$\Rightarrow U=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\\-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}$

$$\therefore A=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\\-\frac{1}{\sqrt2}&\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\sqrt3&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt3}&\frac{1}{\sqrt3}&-\frac{1}{\sqrt3}\\\frac{1}{\sqrt2}&-\frac{1}{\sqrt2}&0\\\frac{1}{\sqrt6}&\frac{1}{\sqrt6}&\frac{2}{\sqrt6}\end{pmatrix}$$

Singular Vector Decomposition V

习题演算

解：

(i). 计算 A^TA 并求解 V和奇异值.

首先计算对称矩阵 $A^TA \in \mathbb{R}^{3\times 3}$：

$$A^TA = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

由$|A^TA - \lambda I| = 0$求特征值 λ：

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 1 \\ 0 & 1-\lambda & 1 \\ 1 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)[(1-\lambda)(2-\lambda)-1] + 1[0-(1-\lambda)] = 0$$

化简得：$(1-\lambda)(\lambda^2 - 3\lambda) = 0$。

解得特征值为：$\lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 0$。

Singular Vector Decomposition VI

习题演算

因为奇异值 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$,所以有

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

下求右奇异向量 V（即 A^TA 的特征向量）：

对于 $\lambda = 1$：解 $(A^TA - I)\vec{v}_1 = 0 \Rightarrow \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2}, & 1/\sqrt{2}, & 0 \end{pmatrix}^T$

对于 $\lambda = 3$：解 $(A^TA - 3I)\vec{v}_2 = 0 \Rightarrow \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6}, & 1/\sqrt{6}, & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}^T$

对于 $\lambda = 0$：解 $A^TA\vec{v}_3 = 0 \Rightarrow \vec{v}_3 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3}, & -1/\sqrt{3}, & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}^T$

由此构造 $V = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3)$。

Singular Vector Decomposition VII
习题演算

(ii). 利用映射关系 $U_1 = AV_1\Delta^{-1}$ 构造 U.

$$U = AV_1\Delta^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{3}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{3}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{3}{\sqrt{18}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{3}{\sqrt{18}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

因为 A 的秩 $r = 2$，且 $U \in \mathbb{R}^{2\times 2}$，此时 $U_1 = (\vec{u}_1, \vec{u}_2)$ 已经构成了完整的正交矩阵 U，无需额外扩充 U_2。

Singular Vector Decomposition VIII
习题演算

最终分解形式:

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

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Singular Vector Decomposition IX

习题演算

再例

$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$,求SVD分解 $A = U\Sigma V^T$。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Singular Vector Decomposition X

习题演算

再例

$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$,求SVD分解 $A = U\Sigma V^T$。

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

【答案】

(i). 计算 A^TA 并求解 V和奇异值.

$$A^TA = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$$

通过特征方程 $|A^TA - \lambda I| = 0$ 求解:

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & 2 \\ 2 & 2-\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)^2 - 4 = 0$$

Singular Vector Decomposition XI

习题演算

解得特征值为：$\lambda_1 = 4, \lambda_2 = 0$。3. 构造奇异值矩阵 Σ 与相关对角阵 Δ奇异值为 $\sigma_1 = \sqrt{4} = 2, \sigma_2 = 0$。构造 2×2 的对角矩阵 Σ：

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

定义非零奇异值对角阵 Δ 及其逆：

$$\Delta = (2), \quad \Delta^{-1} = (1/2)$$

下求解右奇异向量矩阵 V对应特征值 $\lambda_1 = 4, \lambda_2 = 0$ 的单位特征向量为：

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

取非零部分 $V_1 = \vec{v}_1$，完整矩阵 $V = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$。

Singular Vector Decomposition XII

习题演算

(ii). 利用映射关系 $U_1 = AV_1\Delta^{-1}$ **构造** U.
由于 A 的秩 $r = 1$， U 的第一列 U_1为：

$$U_1 = AV_1\Delta^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} (1/2)$$
$$= \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} (1/2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

为了构造正交矩阵 U，我们需要通过施密特正交化或其他方式补全第二列 U_2（需与 U_1 正交且单位化）：

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