特征分解与奇异值分解

Dezeming Family

2021 年 9 月 22 日

DezemingFamily 系列书和小册子因为是电子书，所以可以很方便地进行修改和重新发布。如果您获得了 DezemingFamily 的系列书，可以从我们的网站 [https://dezeming.top/] 找到最新版。对书的内容建议和出现的错误欢迎在网站留言。

20210923：完成第一版。20211230：增加了奇异值分解的直观解释。

目录

一 特征分解

特征分解又叫做相似对角化。

我们设矩阵 A 为 $n\times n$ 方阵，特征值 λ_i 与对应的特征向量 $\boldsymbol{x_i}$。

则矩阵 A 可以分解为：

$$A = P\Lambda P^{-1} \tag{一.1}$$

Λ 是一个对角阵。

如果 A 是实对称矩阵，那么 $P^T=P^{-1}$，即 P 是一个正交矩阵：

如果上面的概念您并不是很清楚，请参阅 DezemingFamily 的《向量组和矩阵的正交性》以及《矩阵的相似对角化》。

二 奇异值分解

注意：奇异值分解的原理需要一些 Hermite 矩阵及其一些定理作为基础，详情请查阅矩阵分析的书籍。这里我们从结论来讲解原理，等本书再版时可能会考虑将完整的证明给出。

奇异值分解，简写为 SVD。

如果矩阵 A 不是方阵，那么就可以使用奇异值分解的方法。一个 $m\times n$ 的矩阵奇异值分解以后得到：

$$A = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V_{n\times n}^T \tag{二.1}$$

其中，Σ 矩阵除了主对角线以外。其他元素都是 0；U 和 V 都是酉矩阵，即满足 $U^TU=I,V^TV=I$。

我们考虑矩阵 (A^TA)，这个矩阵是一个 $n \times n$ 的方阵，进行特征分解，得到下式：

$$(A^TA)v_i = \lambda_i v_i \tag{二.2}$$

再考虑矩阵 (AA^T)，这个矩阵是一个 $m \times m$ 的方阵，进行特征分解，得到下式：

$$(AA^T)u_i = \lambda_i u_i \tag{二.3}$$

我们把 v_i 向量叫做右奇异向量，，构成矩阵 V；u_i 向量叫做左奇异向量，构成矩阵 U。由于 $(A^TA)^T = (A^TA)$，$(AA^T)^T = (AA^T)$，所以该矩阵是一个实对称矩阵，从而 U 和 V 都可以是酉矩阵，即转置等于逆矩阵。

我们可以推导出：

$$A = U\Sigma V^T \Rightarrow \tag{二.4}$$

$$AV = U\Sigma V^T V = U\Sigma \Rightarrow \tag{二.5}$$

$$Av_i = \sigma_i u_i \tag{二.6}$$

奇异值 σ_i 就可以用上面的方法求得。同时：

$$A = U\Sigma V^T \Rightarrow \tag{二.7}$$

$$A^T = V\Sigma U^T \Rightarrow \tag{二.8}$$

$$A^TA = V\Sigma^2 V^T \tag{二.9}$$

我们可以看到，A^TA 的特征向量组成 V 矩阵，AA^T 的特征向量组成 U 矩阵。而且，Σ^2 的主对角线元素我们都能求出来，就是 A^TA 的特征值，因此开平方就能得到奇异值。在计算过程中，我们使用行列中比较小的值构成的矩阵：对于 3×2 的矩阵，我们求 A^TA 的特征值；对于 2×3 的矩阵，我们求 AA^T 的特征值。

还有个地方我们一定要注意：从上面的推导中，我们可以看出，AA^T 和 A^TA 中有完全一样的特征值。即，当 AA^T 是 2×2 的矩阵，A^TA 是 3×3 的矩阵时，A^TA 的特征值包含 AA^T 的特征值。由于对一个矩阵进行特征分解时，特征值在对角阵 Λ 中的位置并不唯一，所以要保证的是在奇异值分解中，v_i 的特征值等于 u_i 的特征值。但是奇异值分解中有一个好处，就是 U 和 V 可以用特征值从大到小排列对应的特征向量组合得到。我们在得到下面的例子会比较清晰地说明这一点。

三　计算举例

设矩阵 A 为：

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{三.1}$$

然后求出 A^TA：

$$A^TA = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \tag{三.2}$$

然后求出特征值和特征向量：

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 = 3 & u_1 = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}) \\ \lambda_2 = 1 & u_2 = (-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}) \end{bmatrix} \tag{三.3}$$

同理，求出 AA^T 的特征值：

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 = 3 & u_1 = (\frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}) \\ \lambda_2 = 1 & u_2 = (\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}) \\ \lambda_3 = 0 & u_2 = (\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}) \end{bmatrix} \tag{三.4}$$

注意两组奇异值都是从大到小排列的，这是一种很好的排列方式，在 PCA 降维中有重要应用（奇异值分解推导中就干脆直接定义 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_r > 0$，其中，$r$ 是矩阵 A 的秩）。求得奇异值：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sigma_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \Longrightarrow \sigma_1 = \sqrt{3} \tag{三.5}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \sigma_2 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \Longrightarrow \sigma_2 = 1 \tag{三.6}$$

我们可以得到奇异值分解的结果：

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{三.7}$$

注意，如果我们不给奇异值从大到小排序，而是按照下面的方式，也能做奇异值分解，但是在工程上不如上面有用：

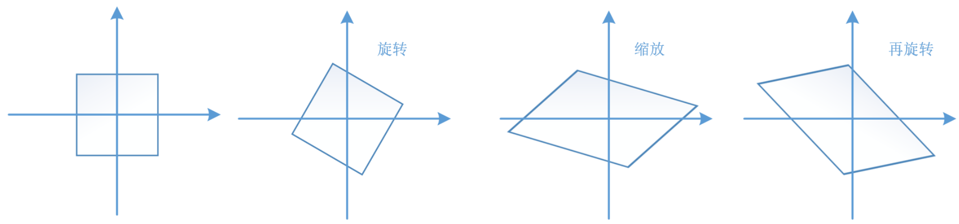
$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{三.8}$$

四　直观的感受

假设 A 是一个方阵，将 A 进行奇异值分解：

$$A = U\Lambda V^T \tag{四.1}$$

U 和 V^T 都是正交矩阵。从形象上进行一下解释 [2]。正交矩阵的作用其实就是旋转操作（正交基变换），而对角矩阵的作用其实就是缩放操作——因此，一个矩阵进行特征分解以后，就能看出这个矩阵的作用：旋转、缩放然后再旋转。



参考文献

[1] https://zhuanlan.zhihu.com/p/29846048

[2] https://www.bilibili.com/video/BV12Q4y1S73g?p=2