第五讲 线性最小二乘问题

奇异值分解 (SVD)

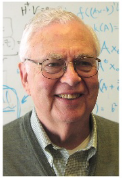
目录

CLEVE'S CORNER

Professor SVD

BY CLEVE MOLER

Stanford computer science professor Gene Golub has done more than anyone to make the singular value decomposition one of the most powerful and widely used tools in modern matrix computation.



Gene Golub

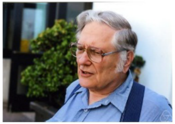
Popularized numerical computing with matrices via the informal "Golub thesis"

"anything worth computing can be stated as a matrix problem"

THE $25,000,000,000[*] EIGENVECTOR
THE LINEAR ALGEBRA BEHIND GOOGLE

KURT BRYAN[†] AND TANYA LEISE[‡]

William Kahan



Formalized IEEE-754 floating point arithmetic.

Make it possible to compute with probabilities as "real numbers" instead of discrete counts.

Gene Golub's license plate, photographed by Professor P. M. Kroonenberg of Leiden University.

5-4 奇异值分解

5.4 奇异值分解

潘建瑜 @MATH.ECNU https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/SC

SVD 不仅是矩阵计算中的重要工具之一, 也是图像处理、压缩感知、机器学习、数据科学等领域的重要技术.

5-4-1 奇异值与奇异值分解

定理 5.1 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 则存在酉矩阵 $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 和 $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 使得

$$U^* AV = \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} \quad 或 \quad A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^*, \tag{5.1}$$

其中 $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n) \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 且

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_n \geq 0.$$

分解 (5.1) 称为 A 的**奇异值分解** (**SVD**), 而 $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$ 则称为 A 的**奇异值**.

✍ 如果 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是实矩阵, 则 U, V 也都可以是实矩阵.

奇异值与特征值

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^* \quad \Longrightarrow \quad A^*A = V\Sigma^*\Sigma V^*, \quad AA^* = U \begin{bmatrix} \Sigma\Sigma^* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^*$$

奇异值与特征值

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^* \quad \Longrightarrow \quad A^*A = V\Sigma^*\Sigma V^*, \quad AA^* = U \begin{bmatrix} \Sigma\Sigma^* & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^*$$

A 的奇异值就是 A^*A 的特征值的平方根.

奇异值与特征值

$$A = U\begin{bmatrix}\Sigma \\ 0\end{bmatrix}V^* \quad \Longrightarrow \quad A^*A = V\Sigma^*\Sigma V^*, \quad AA^* = U\begin{bmatrix}\Sigma\Sigma^* & 0 \\ 0 & 0\end{bmatrix}U^*$$

A 的奇异值就是 A^*A 的特征值的平方根.

- 由于 AA^* 与 A^*A 有相同的非零特征值, 因此也可以通过 AA^* 特征值来计算奇异值.
- 若 $\mathrm{rank}(A) = r \leq n$, 则有 (非零奇异值的个数等于矩阵的秩)

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0.$$

- 特别地, 如果 $\mathrm{rank}(A) = n$, 则奇异值都是正的, 此时对角矩阵 Σ 非奇异.

奇异向量

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^* \quad \Longrightarrow \quad AV = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix}, \quad A^*U = [\Sigma, 0] V$$

$$\begin{aligned} Av_i &= \sigma_i u_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \\ A^* u_i &= \sigma_i v_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \\ A^* u_i &= 0, \quad i = n+1, n+2, \ldots, m. \end{aligned}$$

- 矩阵 $U = [u_1, u_2, \ldots, u_m]$ 的列向量称为 A 的**左奇异向量**
- 矩阵 $V = [v_1, v_2, \ldots, v_n]$ 的列向量称为 A 的**右奇异向量**

降阶 SVD

$$A = \begin{bmatrix} u_1, \dots, u_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1, \dots, v_n \end{bmatrix}^* = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_n u_n v_n^* = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^*$$

降阶 SVD

$$A = \left[u_1, \ldots, u_m\right] \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} \left[v_1, \ldots, v_n\right]^* = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_n u_n v_n^* = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^*$$

记 $U_n = [u_1, u_2, \ldots, u_n] \in \mathbb{C}^{m \times n}$, 则 U_n 是单位列正交矩阵 (即 $U_n^* U_n = I_{n \times n}$), 且

$$\boxed{A = U_n \Sigma V^*} \tag{5.2}$$

这就是 **细 SVD (thin SVD)** 或 **降阶 SVD (reduced SVD)**.

✍ 有的文献将 (5.2) 称为奇异值分解.

截断 SVD

设 $k < n$, 我们称

$$A_k = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_k u_k v_k^* = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*$$

为 A 的 **截断 SVD (truncated SVD**)

截断 SVD

设 $k < n$, 我们称

$$A_k = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_k u_k v_k^* = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*$$

为 A 的 **截断 SVD (truncated SVD)**

如果 $\text{rank}(A) = r < n$, 则 $\sigma_i = 0, i = r+1, \ldots, n$, 此时

$$A = A_r = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^* .$$

截断 SVD

设 $k < n$, 我们称

$$A_k = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_k u_k v_k^* = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*$$

为 A 的 **截断 SVD (truncated SVD**)

如果 $\mathrm{rank}(A) = r < n$, 则 $\sigma_i = 0, i = r+1, \ldots, n$, 此时

$$A = A_r = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^* .$$

截断 SVD 在低秩逼近中有着重要的应用.

奇异值的应用

- 计算矩阵 2-范数和谱条件数
- 计算矩阵的数值秩 (numerical rank)
- 求解最小二乘问题
- 矩阵和张量的低秩分解
- 图像处理, 压缩感知, 主成分分析, 数据分析, ...

5-4-2 奇异值的性质

定理 5.2 设 $A = U\begin{bmatrix}\Sigma \\ 0\end{bmatrix}V^*$ 是 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ 的奇异值分解, 则下面结论成立:

(1) A^*A 的特征值是 σ_i^2, 对应的特征向量是 v_i, $i = 1, 2, \ldots, n$;

(2) AA^* 的特征值是 σ_i^2 和 $m-n$ 个零, 对应的特征向量是 u_i, $i = 1, 2, \ldots, m$;

(3) $\boxed{\|A\|_2 = \sigma_1}$, $\boxed{\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_n^2}}$;

(4) (酉不变性) 设 $X \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 和 $Y \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是酉矩阵, 则 $\boxed{\sigma_i(X^*AY) = \sigma_i(A)}$.

定理 5.3 若 A 非奇异, 则 $\boxed{\kappa_2(A) = \sigma_1/\sigma_n}$.

SVD 的重要应用: 低秩逼近

定理 5.4 设 $A = U_n \Sigma V^*$ 是 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 的降阶 SVD. 令 $A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*$, 则 A_k 是

$$\min_{B\in\mathbb{C}^{m\times n},\ \mathrm{rank}(B)=k} \|A - B\|_2 \tag{5.3}$$

的一个解, 且

$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

此时, 我们称 A_k 是 A 的一个**秩-k 逼近**.

SVD 的重要应用: 低秩逼近

定理 5.4 设 $A = U_n \Sigma V^*$ 是 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 的降阶 SVD. 令 $A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*$, 则 A_k 是

$$\min_{B\in\mathbb{C}^{m\times n},\ \mathrm{rank}(B)=k} \|A - B\|_2 \tag{5.3}$$

的一个解, 且

$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

此时, 我们称 A_k 是 A 的一个**秩-k 逼近**.

✍ 定理中的 (5.3) 式也可以改写为

$$\min_{B\in\mathbb{C}^{m\times n},\ \mathrm{rank}(B)\leq k} \|A - B\|_2$$

谢谢

THANK YOU