

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

14

Singular Value Decomposition

奇异值分解

旋转 → 缩放 → 再旋转

奇异值分解是线性代数工具箱中通用且强大的工具。本书前文介绍的特征值分解、Cholesky 分解、LDL 分解都对矩阵的形状和性质提出要求；但是，奇异值分解对矩阵的形状、性质没有任何要求。任何形状的实数矩阵都可以完成奇异值分解。这一点和 QR 分解类似。但是，不同于 QR 分解的是，奇异值分解揭示了矩阵的内在结构。这种广泛适用性让奇异值分解在数据压缩、特征提取、等场景中大放异彩。

本书在谱分解格拉姆矩阵中已经给奇异值分解做了铺垫，本章让我们全面探讨奇异值分解。

14.1 奇异值分解



本节你将掌握的核心技能：

- ▶ 任意形状实矩阵都能完成奇异值分解。
- ▶ 完全型奇异值分解中， U 与 V 都是正交矩阵
- ▶ U 与 V 表示各自空间的一组规范正交基，可视为旋转操作。
- ▶ S 是对角矩阵，主对角线是奇异值。
- ▶ 矩阵秩等于非零奇异值的个数。
- ▶ 通过求解两个格拉姆矩阵的特征值和特征向量，可重建 SVD 分解过程。

完全型 SVD

给定一个任意实数矩阵 $X_{n \times D}$ ，经过 (完全型) 奇异值分解 (SVD) 得到

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\mathbf{X}_{n \times D} = \mathbf{U}_{n \times n} \mathbf{S}_{n \times D} \mathbf{V}_{D \times D}^T \quad (1)$$

其中,

\mathbf{U} 为左奇异向量矩阵; \mathbf{U} 的列向量为左奇异向量 (left-singular vector)。 \mathbf{U} 为正交矩阵, $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n]$ 张成 \mathbb{R}^n 空间的规范正交基。

\mathbf{S} 为对角矩阵, 主对角线元素为奇异值 (singular value)。几何角度, 奇异值代表的是不同维度的缩放效果。

▲ 注意, 对角矩阵的非主对角线元素均非 0; 此外, 也请大家注意, 对角矩阵可以是非方阵。

\mathbf{V} 为右奇异向量矩阵; \mathbf{V} 的列向量为右奇异向量 (right-singular vector)。 \mathbf{V} 也是正交矩阵, $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_D]$ 张成 \mathbb{R}^D 空间的规范正交基。

图 1 所示完全型 SVD 分解的热图。图 2 所示为四种常见 SVD 分解类型, 本章后续将展开讲解。

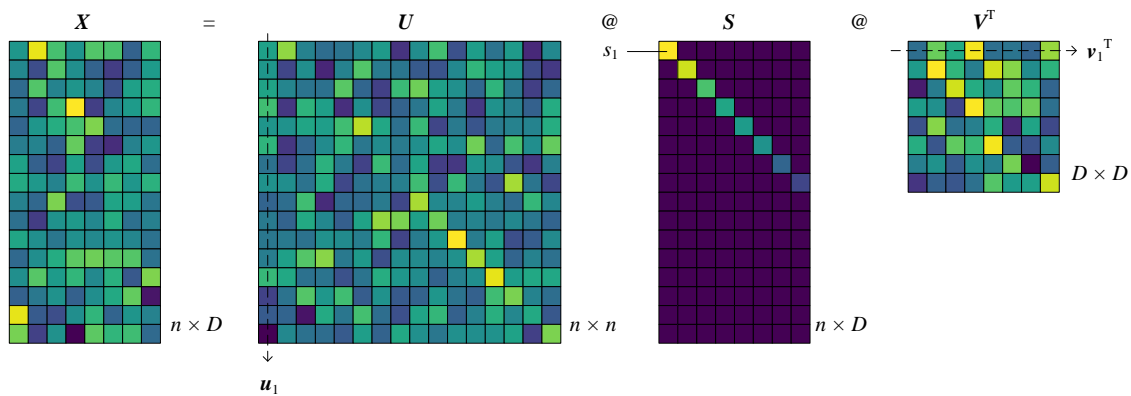


图 1. 完全型 SVD 分解

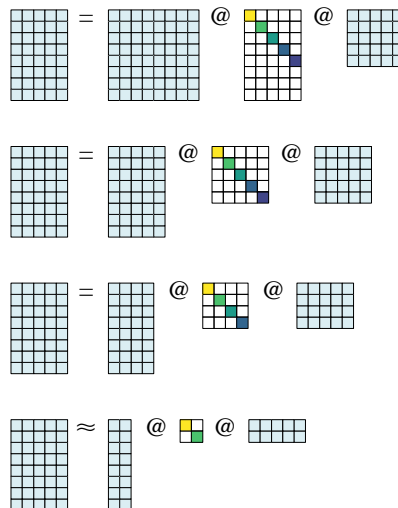


图 2. 四种 SVD 分解

S: 主对角线元素为奇异值

本 PDF 文件为作者草稿, 发布目的为方便读者在移动终端学习, 终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有, 请勿商用, 引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: <https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教, 本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

S 主对角线元素为奇异值，一般按从大到小排列

$$S_{n \times D} = \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} \quad (2)$$

如果 X 满秩， $\text{rank}(X) = D$ ， S 的主对角线元素 (奇异值 s_j) 均大于 0，它们的大小关系一般为：

$$s_1 \geq s_2 \geq \dots s_D > 0 \quad (3)$$

这告诉我们 S 可以切成两块

$$S_{n \times D} = \begin{bmatrix} S_{D \times D} \\ \mathbf{0}_{(n-D) \times D} \end{bmatrix} \quad (4)$$

如果 X 列不满秩，比如 $\text{rank}(X) = r$ ， X 则有 $D - r$ 个奇异值为 0。也就是说，矩阵秩等于非零奇异值的个数。

比如，如图 3 所示，我们将 X 的最后两列替换成 X 前两列，这样的话 X 列不满秩。我们发现有两个奇异值为 0。

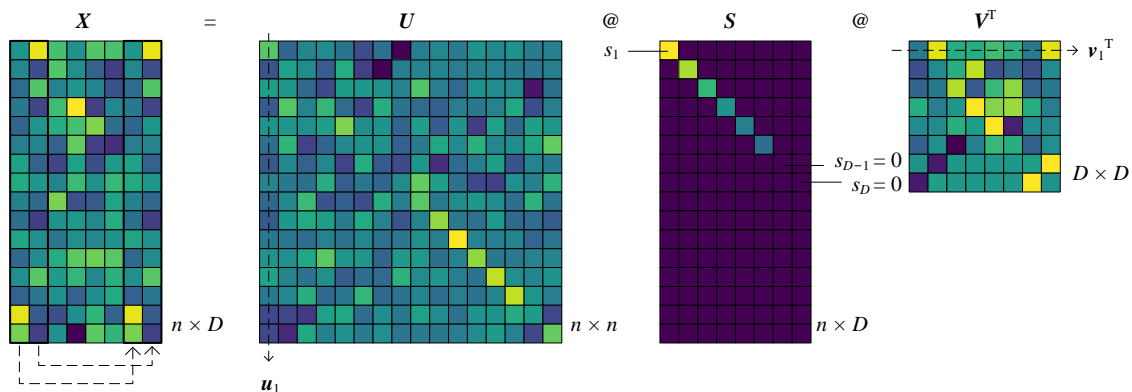


图 3. 完全型 SVD 分解， X 列不满秩

U: 左奇异向量矩阵

完全型 SVD 中，左奇异向量矩阵 U 为正交矩阵，即满足

$$U_{n \times n}^T @ U_{n \times n} = U_{n \times n} @ U_{n \times n}^T = I_{n \times n} \quad (5)$$

用矩阵乘法第一视角展开 $U^T U$

$$U_{n \times n}^T @ U_{n \times n} = \begin{bmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ \vdots \\ u_n^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^T u_1 & u_1^T u_2 & \dots & u_1^T u_n \\ u_2^T u_1 & u_2^T u_2 & \dots & u_2^T u_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_n^T u_1 & u_n^T u_2 & \dots & u_n^T u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

如图 4 所示， U 的列向量为单位向量，且两两正交。此外，如图 5 所示， U 的行向量也均为单位向量，且两两正交。

也就是说，从几何角度来看，正交矩阵 U 可以看作是在 \mathbb{R}^n 空间的旋转。

⚠ 注意，本书前文提过单位矩阵、旋转矩阵、置换矩阵、镜像矩阵，以及它们的复合变换都是正交矩阵；为了方便讨论，我们认为 SVD 中的正交矩阵代表空间旋转。

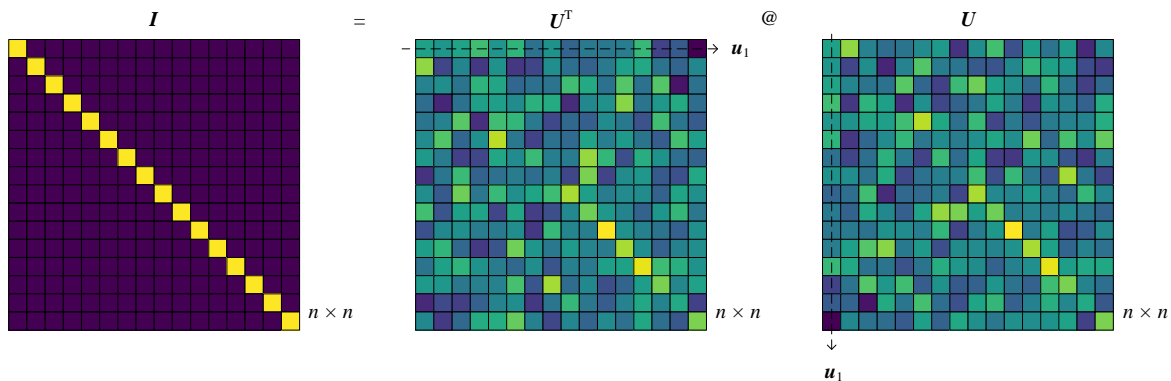


图 4. U 列向量均为单位向量，且两两正交

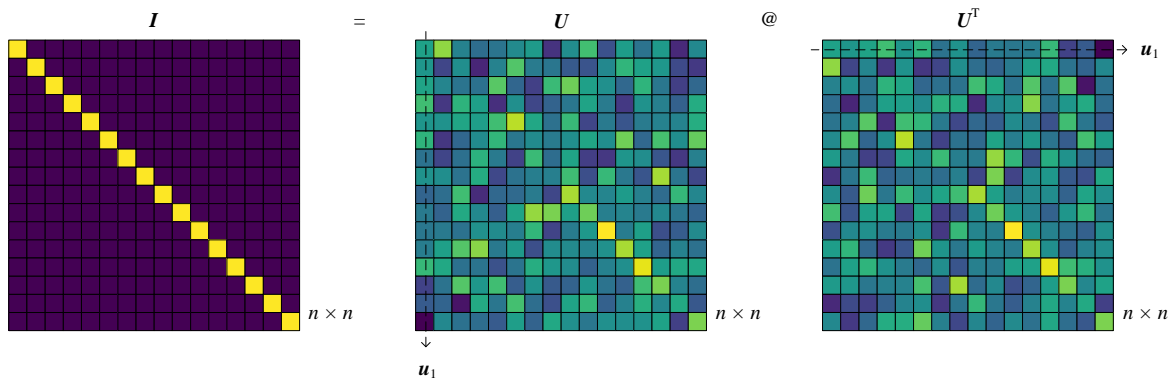


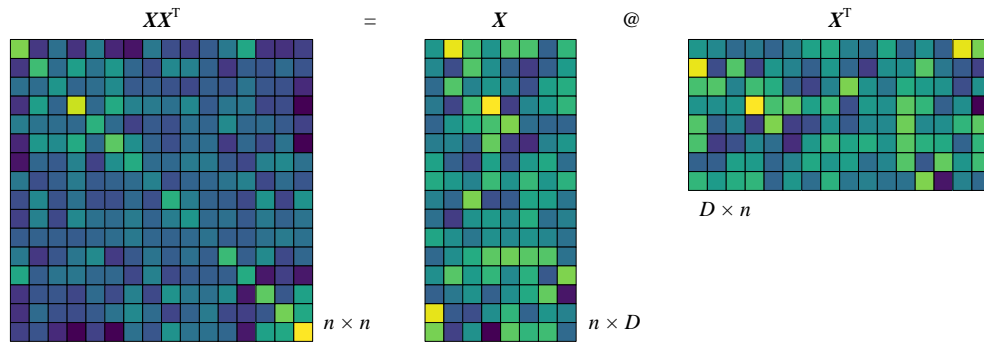
图 5. U 行向量均为单位向量，且两两正交

⚠ 注意，完全型 SVD 中， U 为正交矩阵。其他类型 SVD，比如经济型 SVD， U 为半正交矩阵。

XX^T 的特征值分解

如图 6 所示， XX^T 相当于矩阵 X^T 的格拉姆矩阵。

回顾本书前文有关格拉姆矩阵的内容。格拉玛矩阵为对称矩阵，且半正定或正定。

图 6. 计算格拉姆矩阵 XX^T

根据 (1), XX^T 可以写成

$$XX^T = (USV^T)(USV^T)^T = USV^T V S^T U^T = USS^T U^T \quad (7)$$

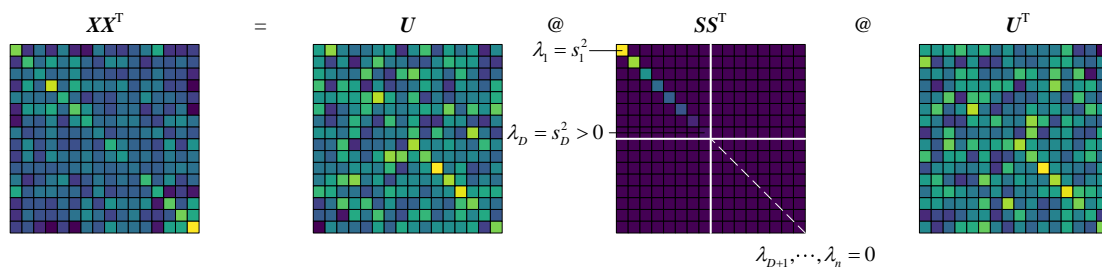
大家是否发现上式就是一个特征值分解!

准确来说, 由于 XX^T 为实对称矩阵, 因此上式是谱分解, 展开得到

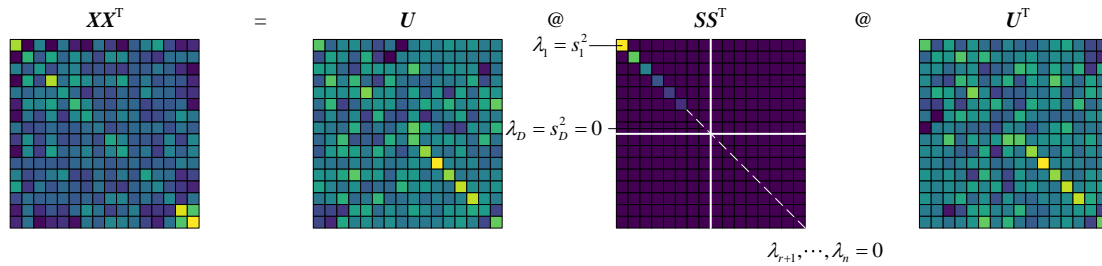
$$XX^T = U \begin{bmatrix} s_1^2 & & & \\ & \ddots & & \\ & & s_D^2 & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 0 \end{bmatrix} U^T \quad (8)$$

大家可以发现 XX^T 的特征值中有大量的 0。

如图 7 所示, 如果 X 列满秩, X 的奇异值均非 0, 这样 XX^T 有 $n-D$ 个特征值为 0。

图 7. XX^T 的特征值分解, X 列满秩

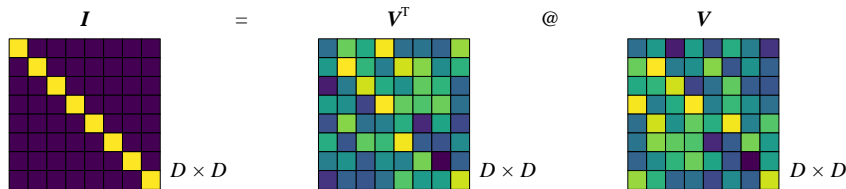
如图 8 所示, 如果 X 列不满秩, 比如 $\text{rank}(X) = r$, 这样 XX^T 有 $n-r$ 个特征值为 0。

图 8. XX^T 的特征值分解, X 列不满秩

V: 右奇异向量矩阵

完全型 SVD 中, 右奇异向量矩阵 V 为正交矩阵, 即满足

$$V_{D \times D}^T @ V_{D \times D} = V_{D \times D} @ V_{D \times D}^T = I_{D \times D} \quad (9)$$

图 9. 右奇异向量矩阵 V 为正交矩阵

用矩阵乘法第一视角展开 $V^T V$

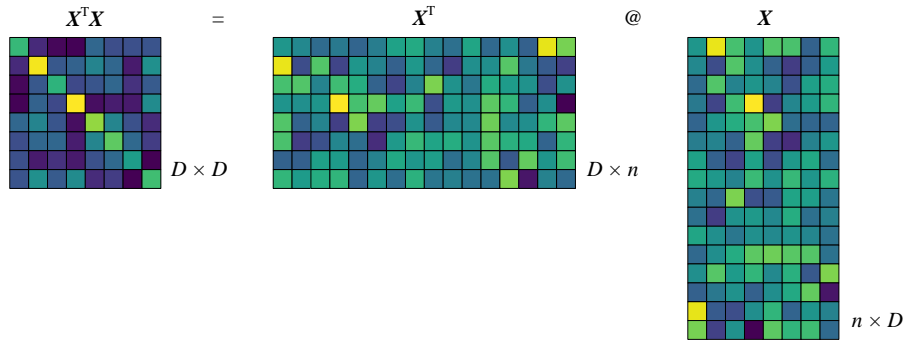
$$V_{D \times D}^T @ V_{D \times D} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \mathbf{v}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_D^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_D \\ \mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{v}_D^T \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_D^T \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_D^T \mathbf{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

也就是说, 从几何角度来看, 正交矩阵 V 可以看作是在 \mathbb{R}^D 空间的旋转。

⚠ 注意, 一般来说 U 、 V 是不同空间的旋转。

$X^T X$ 的特征值分解

如图 10 所示, $X^T X$ 相当于矩阵 X 的格拉姆矩阵。

图 10. 计算格拉姆矩阵 $X^T X$

根据 (1), $X^T X$ 可以写成

$$X^T X = (USV^T)^T (USV^T) = VS^T \underbrace{U^T U}_I SV^T = VS^T SV^T \quad (11)$$

大家是否发现上式也是一个谱分解!



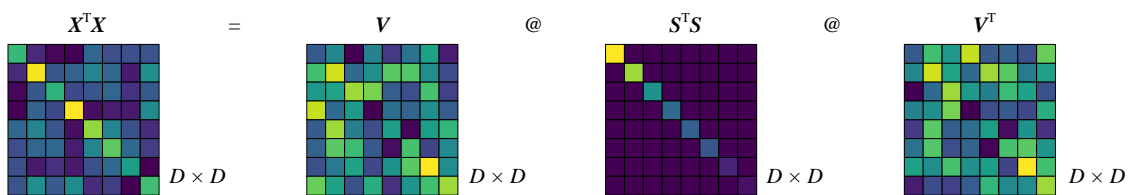
本书前文介绍格拉姆矩阵时聊过这个谱分解。

(11) 可以写成

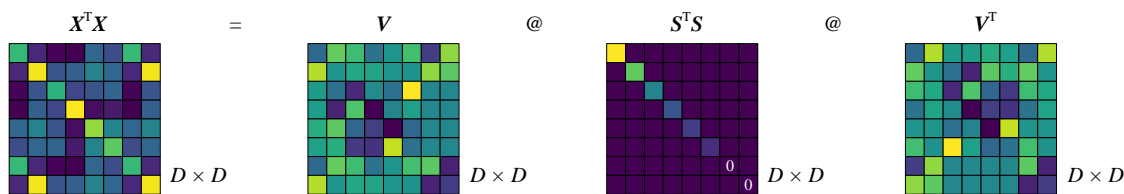
$$X^T X = V \begin{bmatrix} s_1^2 & & \\ & s_2^2 & \\ & & \ddots \\ & & & s_D^2 \end{bmatrix} V^T \quad (12)$$

如图 11 所示, 如果 X 列满秩, 则 $X^T X$ 的特征值均非 0。

比较 (8)、(12), 我们发现两个格拉姆矩阵有相同的非零特征值。

图 11. $X^T X$ 的特征值分解, X 列满秩

如图 12 所示, 如果 X 列不满秩, 比如 $\text{rank}(X) = r$, 这样 $X^T X$ 有 $D - r$ 个特征值为 0。

图 12. $X^T X$ 的特征值分解, X 列不满秩

手解 SVD

图 7 和图 11 实际上给了我们手解奇异值分解的思路——谱分解两个格拉姆矩阵！

下面让我们举例讲解如何手解奇异值分解。

给定如下细高矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

为求解 V , 先计算第一个格拉姆矩阵—— $A^T A$,

$$A^T A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (14)$$

进一步计算得到 $A^T A$ 特征值和特征向量：

$$\begin{cases} \lambda_1 = 3 \\ \mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 2 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \end{cases} \quad \begin{cases} \lambda_2 = 1 \\ \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 2 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \end{cases} \quad (15)$$



有关手解特征值分解, 请大家回顾本书第 11 章第 1 节。

然后, 计算第二个格拉姆矩阵—— AA^T ,

$$AA^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$



注意区分, $A^T A$ 形状为 2×2 , AA^T 形状为 3×3 。

计算 AA^T 特征值和特征向量：

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_1 = 3 \\ u_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \lambda_2 = 1 \\ u_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \lambda_3 = 0 \\ u_3 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix} \end{array} \right\} \quad (17)$$

奇异值矩阵 S 如下：

$$S = \begin{bmatrix} s_1 & 0 \\ 0 & s_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (18)$$

(15) 和 (17) 中都得到了 λ_1 和 λ_2 这两个特征值。

奇异值矩阵 S 对角线元素为 λ_1 和 λ_2 平方根。这一点是特征值分解和 SVD 分解的一个重要的区别，也是一个重要的联系。

因此， A 的完全型 SVD 分解为：

$$A = USV^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}^T \quad (19)$$

手解奇异值分解不是本章的学习目的。大家需要掌握的是奇异值分解背后的数学思想，以及如何利用不同视角理解 SVD 分解。下一节，我们将从几何角度理解奇异值分解。



LA_14_01_01.ipynb 采用上述谱分解两个特拉姆矩阵的方法复刻 SVD 结果。代码同时还使用 `numpy.linalg.svd()` 完成奇异值分解计算。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

Q1. 请手解如下矩阵的奇异值分解，并用 Python 验证结果。

► $A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\blacktriangleright \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5/4 & -3/4 \\ -3/4 & 5/4 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\blacktriangleright \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$