

MIT 18.06 线性代数

第二十九讲：矩阵的 SVD 分解

整理自 MIT 18.06 课程及相关公开笔记

引言

奇异值分解 (Singular Value Decomposition, 简称 SVD) 是线性代数中一种用途广泛的矩阵分解方法。任意矩阵 A (包括长方形矩阵和奇异矩阵) 都可以分解为两个正交矩阵和一个对角矩阵的乘积形式: $A = U\Sigma V^T$ 。这一分解将矩阵的四个基本子空间联系起来, 是理解线性变换本质的重要工具, 在数据压缩、信号处理及最小二乘问题中有着广泛应用。

1 定义

对于任意 $m \times n$ 的矩阵 A , 其奇异值分解 (SVD) 表示为:

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

其中:

- U 是 $m \times m$ 的正交矩阵。
- Σ 是 $m \times n$ 的对角矩阵, 对角线上的元素称为**奇异值**, 且均为非负数, 通常按降序排列。
- V 是 $n \times n$ 的正交矩阵。

特殊情形: 若 A 是对称正定矩阵, 其 SVD 简化为 $A = Q\Lambda Q^T$ (即特征值分解), 此时 $U = V = Q$ 。对于一般矩阵, U 与 V 通常是不同的。

2 几何意义

可将矩阵 A 视为一个线性变换, 它将行空间中的向量映射到列空间中。SVD 的核心思想是: 在行空间中寻找一组**标准正交基**, 使得经过 A 变换后, 它们变成了列空间中的一组标准正交基。

数学表达为:

$$A\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i \quad (i = 1, 2, \dots, r)$$

其中:

- $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r$ 是行空间 $C(A^T)$ 的标准正交基。
- $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$ 是列空间 $C(A)$ 的标准正交基。
- σ_i 是**伸缩因子** (奇异值)。

对于零空间中的向量 $\mathbf{v}_{r+1}, \dots, \mathbf{v}_n$ ，它们被 A 映射为零向量，对应 Σ 对角线上的零元素。同理，左零空间中的向量 $\mathbf{u}_{r+1}, \dots, \mathbf{u}_m$ 对应 Σ 中额外的零行/列。

将上述关系写成矩阵形式：

$$A \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_r & \mathbf{v}_{r+1} & \dots & \mathbf{v}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \dots & \mathbf{u}_r & \mathbf{u}_{r+1} & \dots & \mathbf{u}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \sigma_r & & & \\ & & & 0 & & \end{bmatrix}$$

即 $AV = U\Sigma$ 。由于 V 是正交矩阵， $V^{-1} = V^T$ ，两边右乘 V^T 得到：

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

3 计算方法

为了求得 U, Σ, V ，可以分别计算矩阵 $A^T A$ 和 AA^T 。

3.1 计算 V 与 Σ

考虑矩阵 $A^T A$ ，它是一个 $n \times n$ 的对称半正定矩阵，可以进行正交对角化：

$$A^T A = V \Sigma^T \Sigma V^T = V \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n^2 \end{bmatrix} V^T$$

由此可得：

- V 的列向量是矩阵 $A^T A$ 的**特征向量**。
- 奇异值 σ_i 是 $A^T A$ 特征值 λ_i 的**正平方根**，即 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ 。

3.2 计算 U

类似地，考虑矩阵 AA^T ($m \times m$ 对称半正定矩阵)：

$$AA^T = U \Sigma \Sigma^T U^T = U \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_m^2 \end{bmatrix} U^T$$

由此可得：

- U 的列向量是矩阵 AA^T 的**特征向量**。
- $A^T A$ 与 AA^T 的非零特征值是相同的，均为 σ_i^2 。

3.3 符号确定

在计算过程中，特征向量的符号并不唯一。一旦确定了 V （即确定了 $A^T A$ 的特征向量方向），则 U 的符号必须通过原关系式 $A\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$ 来确定，即：

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{\sigma_i} A\mathbf{v}_i$$

这样可以避免直接通过 AA^T 求特征向量时可能出现的符号不一致问题。

4 示例

4.1 示例一：可逆矩阵的 SVD

给定矩阵 $A = \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix}$ ，求其 SVD。

1. 计算 $A^T A$ ：

$$A^T A = \begin{bmatrix} 4 & -3 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 25 & 7 \\ 7 & 25 \end{bmatrix}$$

其特征值分别为 $\sigma_1^2 = 32$ 和 $\sigma_2^2 = 18$ ，对应单位特征向量为：

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

因此 $V = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$ ， $\Sigma = \begin{bmatrix} \sqrt{32} & 0 \\ 0 & \sqrt{18} \end{bmatrix}$ 。

2. 计算 AA^T ：

$$AA^T = \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & -3 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 32 & 0 \\ 0 & 18 \end{bmatrix}$$

其特征向量为 $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 。

3. 确定符号：利用 $A\mathbf{v}_1 = \sigma_1\mathbf{u}_1$ ，

$$A\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ -3 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8/\sqrt{2} \\ 0 \end{bmatrix} = \sqrt{32} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

同理， $A\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -6/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \sqrt{18} \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$ ，故 $\mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$ 。因此 $U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ 。

4. 分解结果：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{32} & 0 \\ 0 & \sqrt{18} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}^T$$

4.2 示例二：奇异矩阵的 SVD

给定矩阵 $A = \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 8 & 6 \end{bmatrix}$ ，它的秩为 1，即行空间和列空间都是一维的。

1. 行空间与列空间的标准正交基：

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.6 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

2. 计算 σ_1 ： $A^T A$ 的迹为 $80 + 45 = 125$ ，因此 $\sigma_1^2 = 125$ ， $\sigma_1 = 5\sqrt{5}$ ，且 $\sigma_2 = 0$ 。

3. 确定补充的正交基：行空间的补空间（零空间）可取 $\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.6 \\ -0.8 \end{bmatrix}$ ，列空间的补空间（左零空间）可取 $\mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}$ 。

4. 分解结果:

$$A = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5\sqrt{5} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.8 & 0.6 \\ 0.6 & -0.8 \end{bmatrix}^T$$

5 四个基本子空间

SVD 不仅给出了矩阵的分解, 还清晰地刻画了矩阵的四个基本子空间:

- $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r$ 是行空间 $C(A^T)$ 的标准正交基。
- $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$ 是列空间 $C(A)$ 的标准正交基。
- $\mathbf{v}_{r+1}, \dots, \mathbf{v}_n$ 是零空间 $N(A)$ 的标准正交基。
- $\mathbf{u}_{r+1}, \dots, \mathbf{u}_m$ 是左零空间 $N(A^T)$ 的标准正交基。

在这些基下, 线性变换 A 的作用表现为简单的坐标伸缩, 即 $A\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$ 。

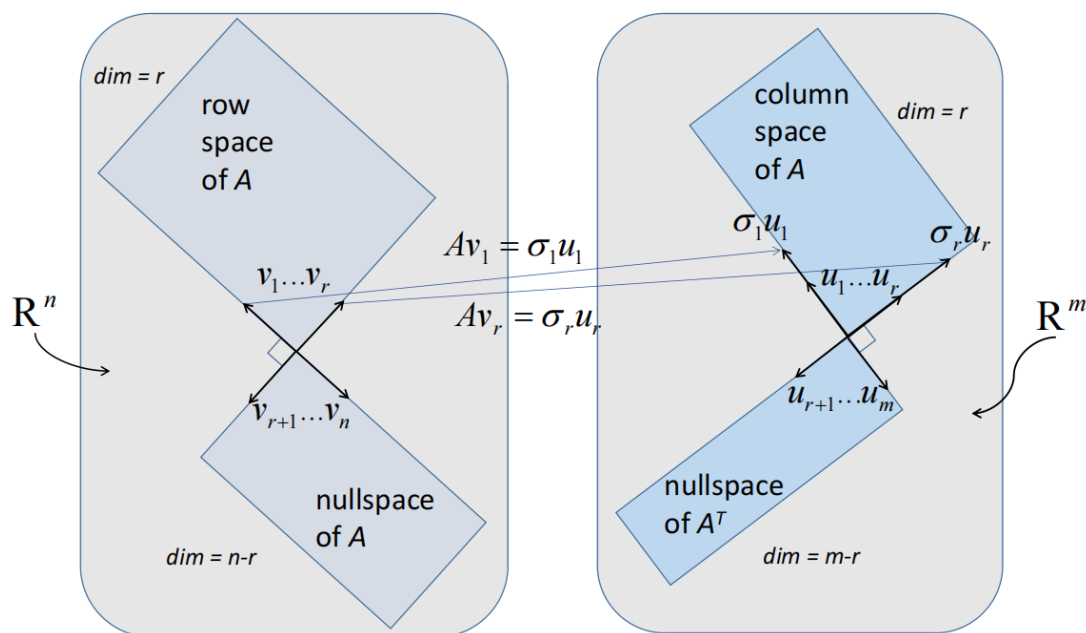


Figure 11.2: Orthonormal bases that diagonalize A using the SVD.

总结

- 任意矩阵 A 均可分解为 $A = U\Sigma V^T$, 其中 U, V 是正交矩阵, Σ 是对角矩阵。
- SVD 将行空间的一组正交基映射为列空间的一组正交基, 奇异值 σ_i 控制伸缩比例。
- 通过求解 $A^T A$ 与 AA^T 的特征值和特征向量可以分别得到 V 和 U 。
- SVD 是理解矩阵四个基本子空间的工具, 也是最小二乘问题、图像压缩等应用的理论基础。

补充 1: SVD 的几何意义

SVD 揭示了任意矩阵 A 对向量 $\mathbf{x}$ 的线性变换可以分解为三个清晰的步骤。对于二维情形，将一个单位圆（或一组正交基向量）经过矩阵 A 的变换，最终会变成椭圆（或一组伸缩后的正交向量）。

1. **第一步：输入空间的旋转（由 V^T 完成）** V^T 将输入向量 $\mathbf{x}$ 从标准坐标系转换到由 V 的列向量定义的正交坐标系中。由于 V 是正交矩阵，这一旋转不改变向量的长度，也不改变向量之间的夹角。
2. **第二步：坐标轴方向的伸缩（由 Σ 完成）** 对角矩阵 Σ 对转换后的坐标分量分别进行缩放：沿 $\mathbf{v}_1$ 方向拉伸 σ_1 倍，沿 $\mathbf{v}_2$ 方向压缩 σ_2 倍。这使原本的单位圆变成了一个椭圆，其半轴长度等于对应的奇异值。
3. **第三步：输出空间的旋转（由 U 完成）** U 将伸缩后的椭圆从 V 坐标系旋转回标准坐标系，但方向由 U 的列向量决定，即变换后的椭圆主轴方向与 U 的列向量对齐。

关键结论：

- **奇异值的含义：** 奇异值 σ_i 代表了变换在 $\mathbf{v}_i$ 方向上的伸缩倍数。 σ_i 越大，该方向上的信息越重要； $\sigma_i = 0$ 意味着矩阵在该方向上将空间压缩为零维（信息丢失），这也正是矩阵“奇异”（不可逆）的几何本质。
- **矩阵的“谱”与“秩”：** 奇异值的集合被称为矩阵的谱，它比秩提供了更细腻的信息。满秩矩阵也可能因奇异值过小而接近不可逆，奇异值谱能敏锐地反映出这种“病态”性质。

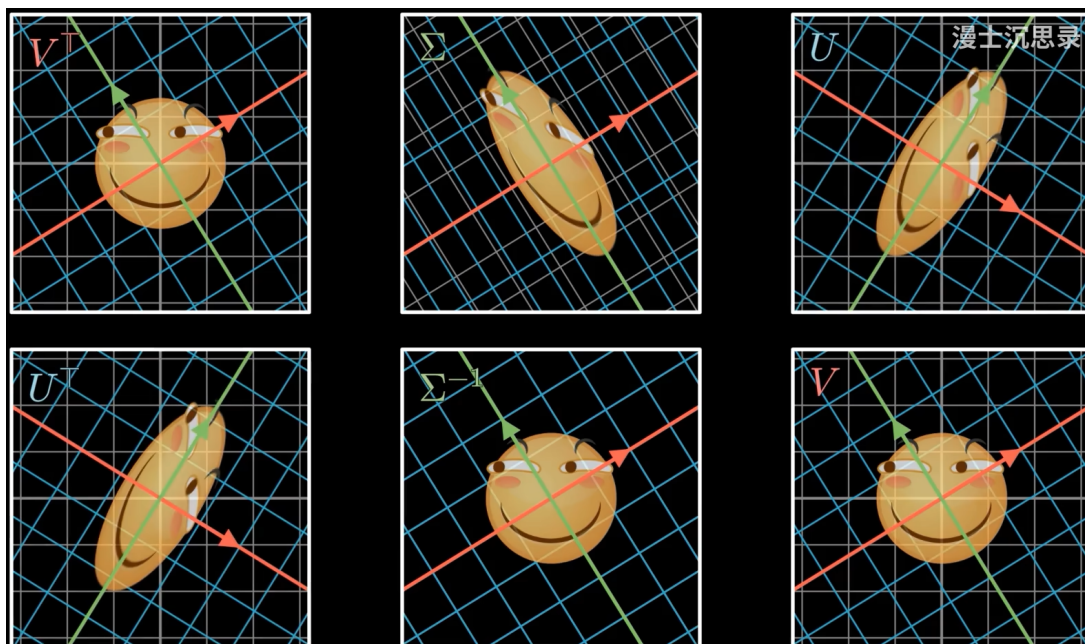


图 1: SVD 的几何意义: V^T 旋转、 Σ 拉伸成椭圆、 U 再旋转。

补充 2：矩阵分解对比

5.1 特征值分解 (Eigenvalue Decomposition): $A = S\Lambda S^{-1}$

几何过程：

1. S^{-1} 将向量从标准坐标系变换到由 S 的特征向量构成的“特征坐标系”；
2. Λ 在特征坐标系中沿特征向量方向进行各向异性伸缩；
3. S 将伸缩后的向量变换回标准坐标系。

特点： S 是特征向量矩阵，通常非正交。

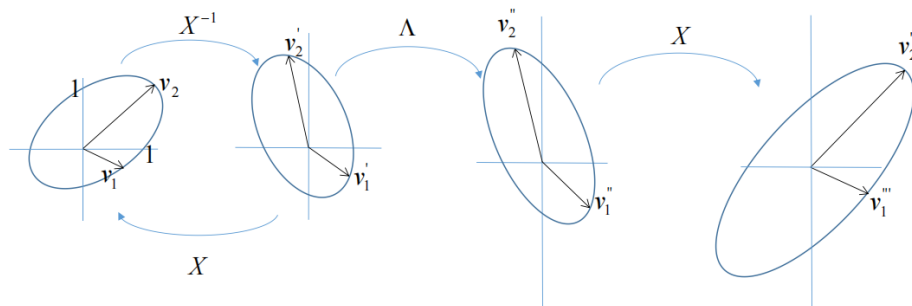


图 2: 特征值分解的几何过程: X^{-1} 变换、 Λ 伸缩、 X 变换回

5.2 谱分解 (Spectral Decomposition): $A = Q\Lambda Q^T$

几何过程：

1. Q^T 将向量旋转或反射到“谱坐标系”（特征向量坐标系）；
2. Λ 在谱坐标系中沿特征向量方向进行伸缩；
3. Q 将伸缩后的向量旋转回标准坐标系。

特点： Q 是正交矩阵，因此这一分解在改变坐标系的同时保持向量长度和夹角不变。

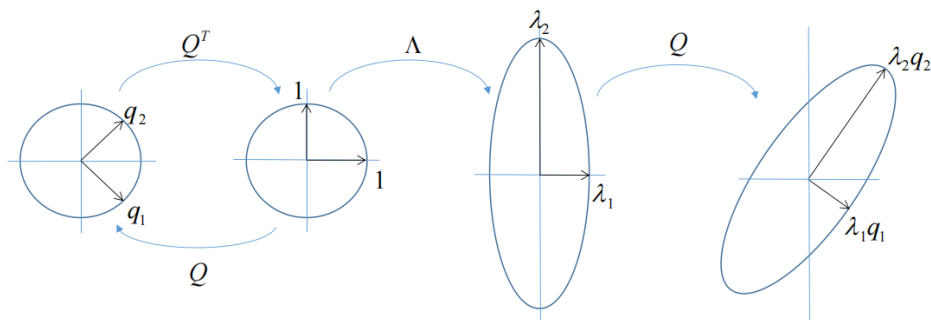


图 3: 谱分解的几何过程: Q^T 旋转、 Λ 伸缩、 Q 旋转回

5.3 SVD: $A = U\Sigma V^T$

几何过程：

1. V^T 将向量旋转或反射到 V 坐标系（行空间标准正交基）；
2. Σ 沿奇异值方向进行拉伸或压缩；
3. U 将伸缩后的向量旋转或反射到 U 坐标系（列空间标准正交基）。

特点：适用于任意矩阵（包括长方阵）。 U 和 V 均是正交矩阵，保持了向量长度与夹角，即圆经变换后变为椭圆但不会歪斜。

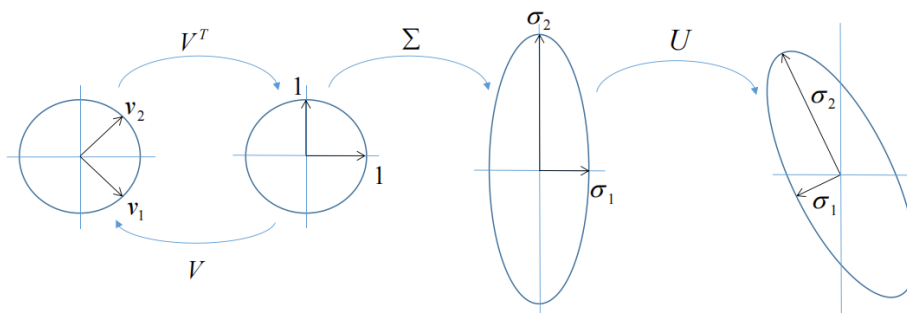


图 4: SVD 的几何过程: V^T 旋转、 Σ 拉伸成椭圆、 U 旋转

5.4 对称半正定矩阵的 SVD: $A = V\Sigma V^T$

几何过程：

1. V^T 将向量旋转或反射到特征向量坐标系；
2. Σ 沿奇异值方向进行伸缩；
3. V 将伸缩后的向量旋转回标准坐标系。

特点：此分解实际上是 SVD 的一种特殊情形（即 $U = V$ ），它代表了一种“旋转-伸缩-再旋转”的对称过程，常用于极分解（Polar Decomposition）的推导。

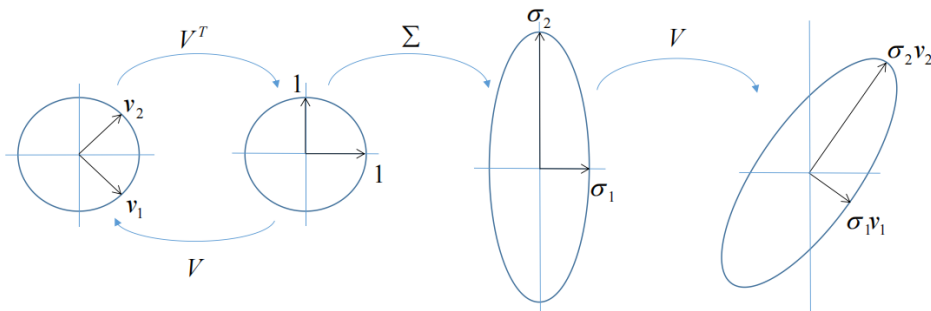
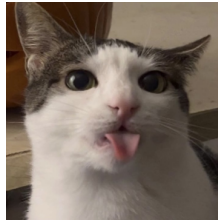


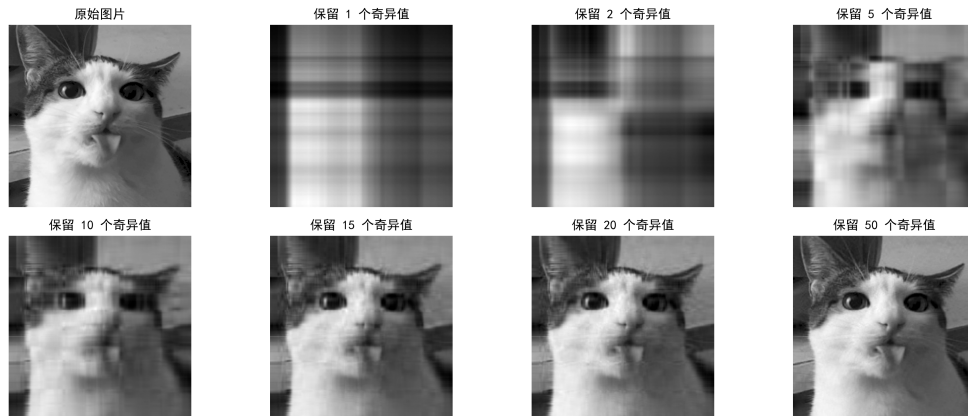
图 5: $V\Sigma V^T$ 的几何过程: V^T 旋转、 Σ 伸缩、 V 旋转回

补充 3: SVD 的应用及代码实现



```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import cv2
4
5 # 设置中文字体，避免图片保存后中文乱码
6 plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimHei']
7
8 # 1. 读取灰度图像
9 img = cv2.imread("test_cat.png", cv2.IMREAD_GRAYSCALE)
10
11 # 2. SVD 分解
12 U, S, Vt = np.linalg.svd(img)
13
14 # 3. 绘制不同奇异值数量重构对比图
15 plt.figure(figsize=(14, 6))
16
17 # 原始图片
18 plt.subplot(2, 4, 1)
19 plt.imshow(img, cmap='gray')
20 plt.title("原始图片")
21 plt.axis('off')
22
23 # 保留前 1, 2, 5, 10, 15, 20, 50 个奇异值
24 components = [1, 2, 5, 10, 15, 20, 50]
25 for i, k in enumerate(components):
26     k = min(k, len(S)) # 防止 k 大于奇异值总数，避免索引越界报错。
27     compressed = np.matrix(U[:, :k]) @ np.diag(S[:k]) @ np.matrix(Vt[:k, :])
28     # U[:, :k]: 取 U 的前 k 列（对应最重要的 k 个左奇异向量）。
29     # diag(S[:k]): 将 S 的前 k 个奇异值构造成对角矩阵。
30     # Vt[:k, :]: 取 Vt 的前 k 行。
31
32     plt.subplot(2, 4, i + 2)
33     plt.imshow(compressed, cmap='gray')
34     plt.title(f"保留 {k} 个奇异值")
35     plt.axis('off')
36
37 plt.suptitle('灰度图像 SVD 压缩效果对比', fontsize=16)
38 plt.tight_layout()
39 plt.show()
```

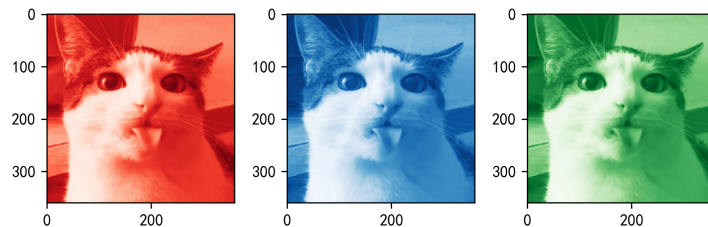
灰度图像 SVD 压缩效果对比



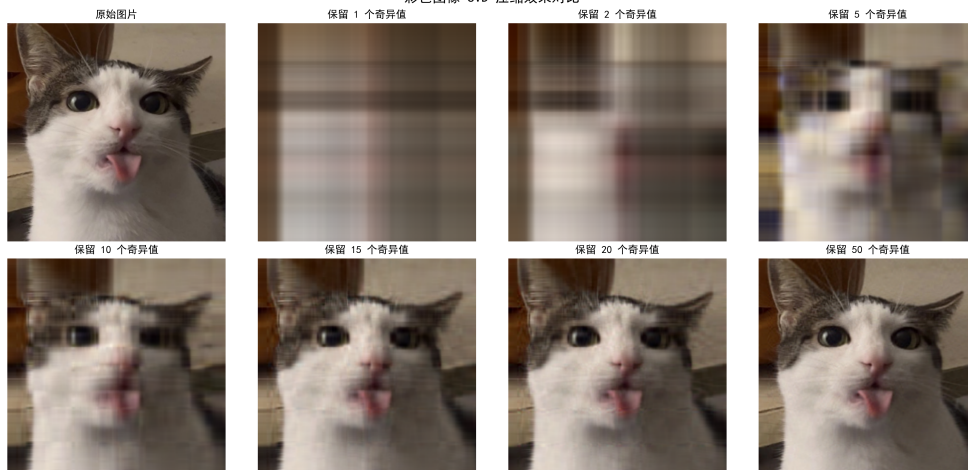
```

1 # 彩色图像由 R、G、B 三个通道组成
2 color_image = cv2.imread('test_cat.png')
3 B, G, R = cv2.split(color_image)
4
5 plt.subplot(1, 3, 1)
6 plt.imshow(R, cmap='Reds_r')
7 plt.subplot(1, 3, 2)
8 plt.imshow(B, cmap='Blues_r')
9 plt.subplot(1, 3, 3)
10 plt.imshow(G, cmap='Greens_r')
11 plt.tight_layout()
12 plt.show()
13 # 压缩过程需要分别对三个通道进行 SVD 分解，然后重组（代码略）

```



彩色图像 SVD 压缩效果对比



```

1  # 4. 绘制奇异值衰减曲线图
2  plt.figure(figsize=(12, 5))
3
4  # 左图：线性坐标
5  plt.subplot(1, 2, 1)
6  plt.plot(range(1, len(S) + 1), S, color='blue')
7  plt.title('奇异值分布 (线性坐标)')
8  plt.xlabel('索引')
9  plt.ylabel('奇异值')
10 plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
11
12 # 右图：对数坐标
13 plt.subplot(1, 2, 2)
14 plt.plot(range(1, len(S) + 1), S, color='red')
15 plt.title('奇异值分布 (对数坐标)')
16 plt.xlabel('索引')
17 plt.ylabel('奇异值 (log)')
18 plt.yscale('log')
19 plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6, which='both')
20
21 plt.tight_layout()
22 plt.show()

```

