奇异值分解(SVD) 的 几何意义

2016-08-10 算法与数学之美

出自余露科学网博客

原文：http://www.ams.org/samplings/feature-column/fcarc-svd

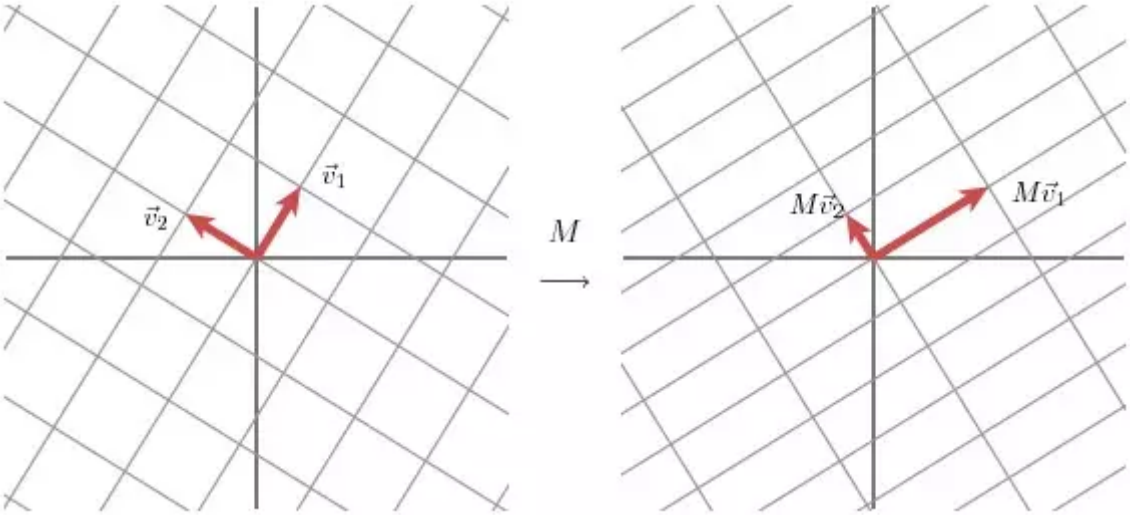
PS：一直以来对SVD分解似懂非懂，此文为译文，原文以细致的分析+大量的可视化图形演示了SVD的几何意义。能在有限的篇幅把这个问题讲解的如此清晰，实属不易。原文举了一个简单的图像处理问题，简单形象，真心希望路过的各路朋友能从不同的角度阐述下自己对SVD实际意义的理解，比如 个性化推荐中应用了SVD，文本以及Web挖掘的时候也经常会用到SVD。

关于线性变换部分的一些知识可以猛戳这里 奇异值分解(SVD) --- 线性变换几何意义

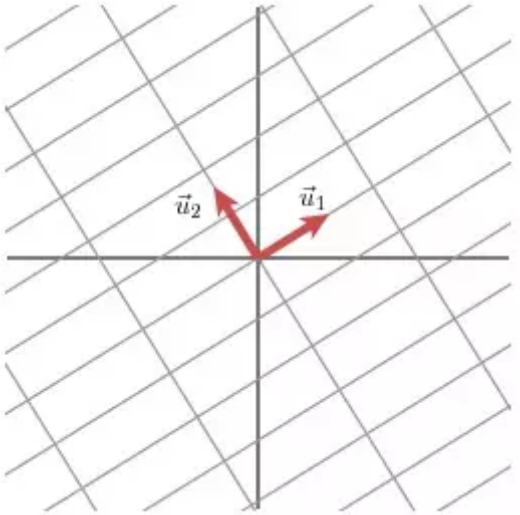
奇异值分解(The singular value decomposition)

该部分是从几何层面上去理解二维的SVD：对于任意的 2 x 2 矩阵，通过SVD可以将一个相互垂直的网格(orthogonal grid)变换到另外一个相互垂直的网格。

我们可以通过向量的方式来描述这个事实: 首先，选择两个相互正交的单位向量 $\mathbf{v_1}$ 和 $\mathbf{v_2}$, 向量$M\mathbf{v_1}$ 和 $M\mathbf{v_2}$ 正交。



$\mathbf{u_1}$ 和 $\mathbf{u_2}$分别表示$M\mathbf{v_1}$ 和 $M\mathbf{v_2}$的单位向量，$\sigma_1 * \mathbf{u_1} = M\mathbf{v_1}$ 和 $\sigma_2 * \mathbf{u_2} = M\mathbf{v_2}$。$\sigma_1$ 和 σ_2分别表示这不同方向向量上的模，也称作为矩阵 M 的奇异值。



这样我们就有了如下关系式

$M\mathbf{v_1} = \sigma_1\mathbf{u_1}$
$M\mathbf{v_2} = \sigma_2\mathbf{u_2}$

我们现在可以简单描述下经过 M 线性变换后的向量 x 的表达形式。由于向量$\mathbf{v_1}$ 和 $\mathbf{v_2}$是正交的单位向量，我们可以得到如下式子：

$\mathbf{x} = (\mathbf{v_1} \cdot \mathbf{x})\ \mathbf{v_1} + (\mathbf{v_2} \cdot \mathbf{x})\ \mathbf{v_2}$

这就意味着：

$M\mathbf{x} = (\mathbf{v_1} \cdot \mathbf{x})\ M\mathbf{v_1} + (\mathbf{v_2} \cdot \mathbf{x})\ M\mathbf{v_2}$
$M\mathbf{x} = (\mathbf{v_1} \cdot \mathbf{x})\ \sigma_1\mathbf{u_1} + (\mathbf{v_2} \cdot \mathbf{x})\ \sigma_2\mathbf{u_2}$

向量内积可以用向量的转置来表示，如下所示

$\mathbf{v} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{v}^T\mathbf{x}$

最终的式子为

$M\mathbf{x} = \mathbf{u_1}\sigma_1\ \mathbf{v_1}^T\mathbf{x} + \mathbf{u_2}\sigma_2\ \mathbf{v_2}^T\mathbf{x}$
$M = \mathbf{u_1}\sigma_1\ \mathbf{v_1}^T + \mathbf{u_2}\sigma_2\ \mathbf{v_2}^T$

上述的式子经常表示成

$M = U\Sigma V^T$

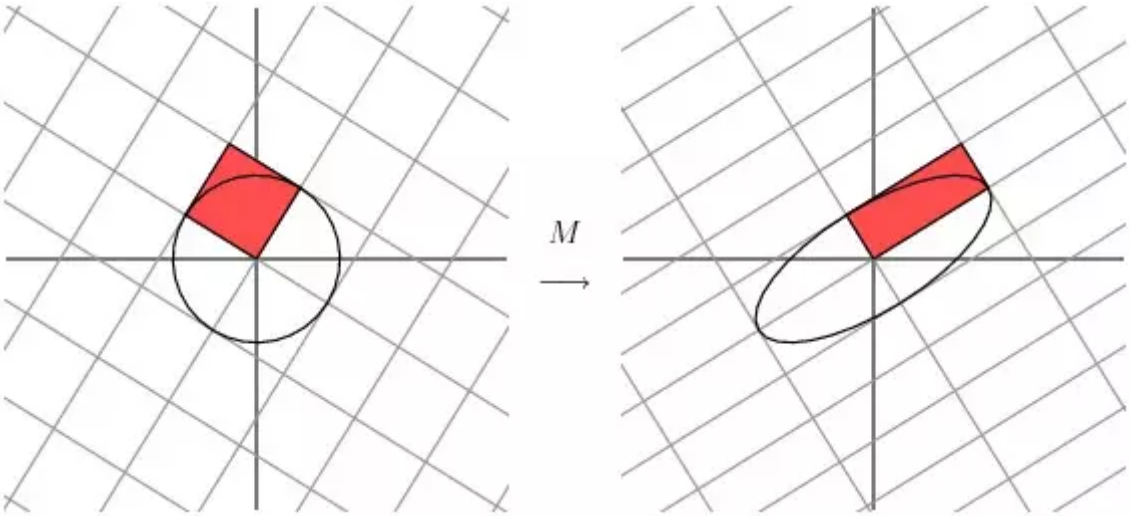
u 矩阵的列向量分别是$\mathbf{u_1}$,$\mathbf{u_2}$ ，Σ 是一个对角矩阵，对角元素分别是对应的σ_1 和 σ_2，**V** 矩阵的列向量分别是$\mathbf{v_1}$,$\mathbf{v_2}$。上角标 *T* 表示矩阵 **V** 的转置。

这就表明任意的矩阵 M 是可以分解成三个矩阵。**V** 表示了原始域的标准正交基，**u** 表示经过 M 变换后的co-

domain的标准正交基，Σ 表示了**V** 中的向量与**u** 中相对应向量之间的关系。(V describes an orthonormal basis in the domain, and U describes an orthonormal basis in the co-domain, and Σ describes how much the vectors in V are stretched to give the vectors in U.)

如何获得奇异值分解？(How do we find the singular decomposition?)

事实上我们可以找到任何矩阵的奇异值分解，那么我们是如何做到的呢？假设在原始域中有一个单位圆，如下图所示。经过 M 矩阵变换以后在co-domain中单位圆会变成一个椭圆，它的长轴($M\mathbf{v_1}$)和短轴($M\mathbf{v_2}$)分别对应转换后的两个标准正交向量，也是在椭圆范围内最长和最短的两个向量。



换句话说，定义在单位圆上的函数$|M\mathbf{x}|$分别在$\mathbf{v_1}$和$\mathbf{v_2}$方向上取得最大和最小值。这样我们就把寻找矩阵的奇异值分解过程缩小到了优化函数$|M\mathbf{x}|$上了。结果发现（具体的推到过程这里就不详细介绍了）这个函数取得最优值的向量分别是矩阵 MT M 的特征向量。由于MTM是对称矩阵，因此不同特征值对应的特征向量都是互相正交的，我们用vi表示MTM的所有特征向量。奇异值$\sigma_i = |M\mathbf{v_i}|$ ， 向量 $\mathbf{u_i}$ 为 $M\mathbf{v_i}$ 方向上的单位向量。但为什么$\mathbf{u_i}$也是正交的呢？

推倒如下：

σ_i 和 σ_j分别是不同两个奇异值

$M\mathbf{v_i} = \sigma_i\mathbf{u_i}$
$M\mathbf{v_j} = \sigma_j\mathbf{u_j}$.

我们先看下$M\mathbf{v_i} \cdot M\mathbf{v_j}$，并假设它们分别对应的奇异值都不为零。一方面这个表达的值为0，推到如下

$M\mathbf{v_i} \cdot M\mathbf{v_j} = \mathbf{v_i}^T M^T M\mathbf{v_j} = \mathbf{v_i} \cdot M^T M\mathbf{v_j} = \lambda_j \mathbf{v_i} \cdot \mathbf{v_j} = 0$

另一方面，我们有

$M\mathbf{v_i} \cdot M\mathbf{v_j} = \sigma_i\sigma_j\, \mathbf{u_i} \cdot \mathbf{u_j} = 0$

因此，$\mathbf{u_i}$ 和 $\mathbf{u_j}$是正交的。但实际上，这并非是求解奇异值的方法，效率会非常低。这里也主要不是讨论如何求解奇

异值，为了演示方便，采用的都是二阶矩阵。

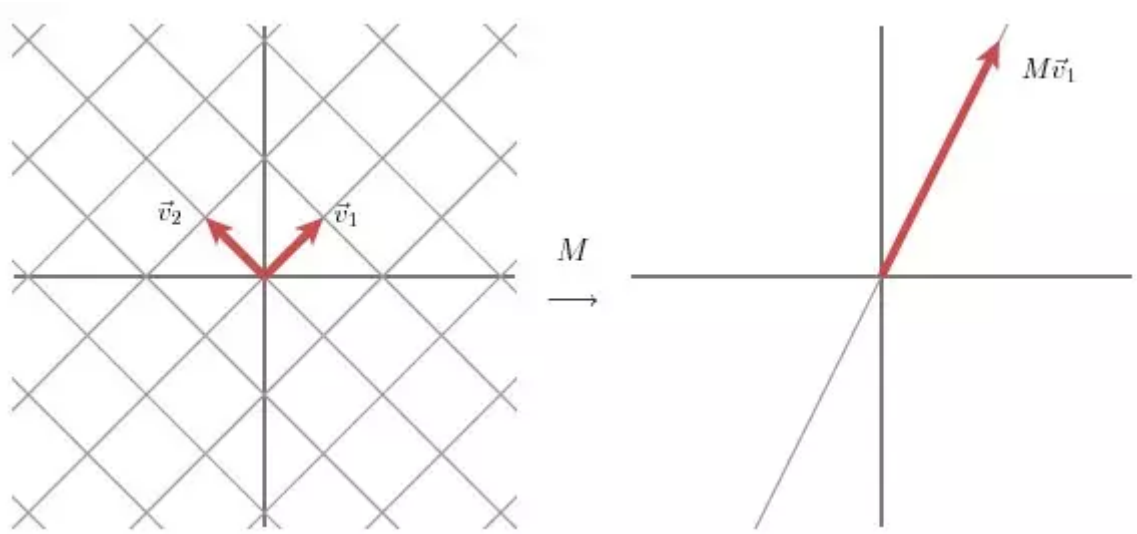
应用实例(Another example)

现在我们来看几个实例。

实例一

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

经过这个矩阵变换后的效果如下图所示



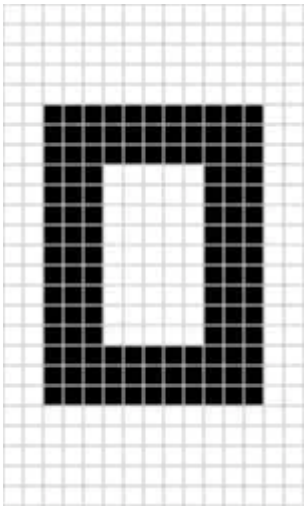
在这个例子中，第二个奇异值为 0，因此经过变换后只有一个方向上有表达。

M = $\mathbf{u_1}\sigma_1\ \mathbf{v_1}^T$.

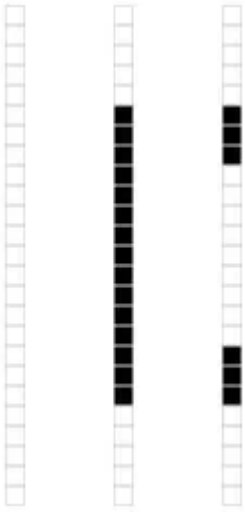
换句话说，如果某些奇异值非常小的话，其相对应的几项就可以不同出现在矩阵 M 的分解式中。因此，我们可以看到矩阵 M 的秩的大小等于非零奇异值的个数。

实例二

我们来看一个奇异值分解在数据表达上的应用。假设我们有如下的一张 15 x 25 的图像数据。



如图所示，该图像主要由下面三部分构成。



我们将图像表示成 15 x 25 的矩阵，矩阵的元素对应着图像的不同像素，如果像素是白色的话，就取 1，黑色的就取 0. 我们得到了一个具有375个元素的矩阵，如下图所示

$$M=\begin{bmatrix}
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&1&1&1&1&1&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&1&1\\
1&1&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&0&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\\
1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1
\end{bmatrix}$$

如果我们对矩阵M进行奇异值分解以后，得到奇异值分别是

$\sigma_1 = 14.72$
$\sigma_2 = 5.22$
$\sigma_3 = 3.31$

矩阵M就可以表示成

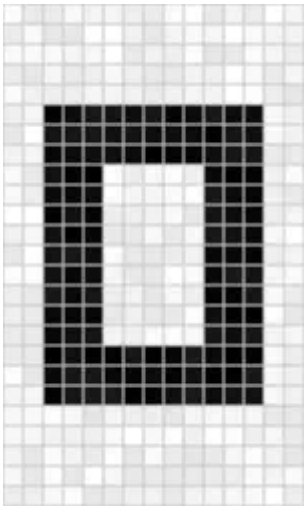
$M=\mathbf{u}_1\sigma_1\,\mathbf{v}_1^T + \mathbf{u}_2\sigma_2\,\mathbf{v}_2^T + \mathbf{u}_3\sigma_3\,\mathbf{v}_3^T$

$\mathbf{v}_i$具有15个元素，$\mathbf{u}_i$ 具有25个元素，σ_i 对应不同的奇异值。如上图所示，我们就可以用123个元素来表示具有375个元素的图像数据了。

实例三

减噪(noise reduction)

前面的例子的奇异值都不为零，或者都还算比较大，下面我们来探索一下拥有零或者非常小的奇异值的情况。通常来讲，大的奇异值对应的部分会包含更多的信息。比如，我们有一张扫描的，带有噪声的图像，如下图所示



我们采用跟实例二相同的处理方式处理该扫描图像。得到图像矩阵的奇异值：

$\sigma_1 = 14.15$

$\sigma_2 = 4.67$

$\sigma_3 = 3.00$

$\sigma_4 = 0.21$

$\sigma_5 = 0.19$

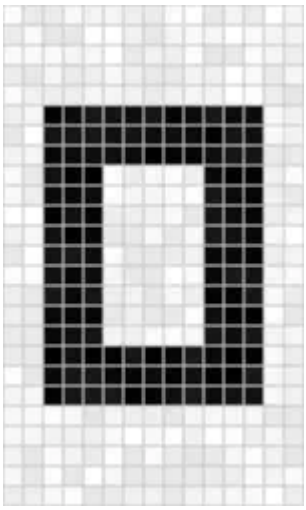
...

$\sigma_{15} = 0.05$

很明显，前面三个奇异值远远比后面的奇异值要大，这样矩阵 M 的分解方式就可以如下：

$$M \approx \mathbf{u}_1\sigma_1 \mathbf{v}_1^T + \mathbf{u}_2\sigma_2 \mathbf{v}_2^T + \mathbf{u}_3\sigma_3 \mathbf{v}_3^T$$

经过奇异值分解后，我们得到了一张降噪后的图像。

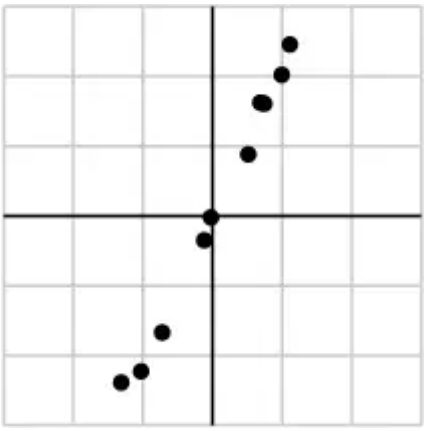


实例四

数据分析(data analysis)

我们搜集的数据中总是存在噪声：无论采用的设备多精密，方法有多好，总是会存在一些误差的。如果你们还记得上文提到的，大的奇异值对应了矩阵中的主要信息的话，运用SVD进行数据分析，提取其中的主要部分的话，还是相当合理的。

作为例子，假如我们搜集的数据如下所示：



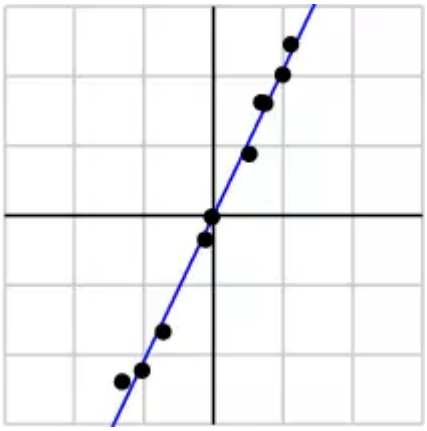
我们将数据用矩阵的形式表示：

-1.03 0.74 -0.02 0.51 -1.31 0.99 0.69 -0.12 -0.72 1.11
-2.23 1.61 -0.02 0.88 -2.39 2.02 1.62 -0.35 -1.67 2.46

经过奇异值分解后，得到

$\sigma_1 = 6.04$
$\sigma_2 = 0.22$

由于第一个奇异值远比第二个要大，数据中有包含一些噪声，第二个奇异值在原始矩阵分解相对应的部分可以忽略。经过SVD分解后，保留了主要样本点如图所示



就保留主要样本数据来看，该过程跟PCA(principal component analysis)技术有一些联系，PCA也使用了SVD去检测数据间依赖和冗余信息.

总结(Summary)

这篇文章非常的清晰的讲解了SVD的几何意义，不仅从数学的角度，还联系了几个应用实例形象的论述了SVD是如何发现数据中主要信息的。在netflix prize中许多团队都运用了矩阵分解的技术，该技术就来源于SVD的分解思想，矩阵分解算是SVD的变形，但思想还是一致的。之前算是能够运用矩阵分解技术于个性化推荐系统中，但理解起来不够直观，阅读原文后醍醐灌顶，我想就从SVD能够发现数据中的主要信息的思路，就几个方面去思考下如何利用数据中所蕴含的潜在关系去探索个性化推荐系统。也希望路过的各位大侠不吝分享呀。

交流分享、谢谢支持！

<如果你觉得本文还不错，对你的学习带来了些许帮助，请帮忙扫描二维码，支持本公众号的运营>