奇异值的物理意义是什么?

矩阵奇异值的物理意义是什么？ 或者说，奇异值形象一点的意义是什么？ 把m*n矩阵看作从m维空间到n维空间的一个线性映射， 是否： 各奇异向量就是坐标轴，奇异值...显示全部

郑宁
You shall know the difference now that I am back again.

矩阵的奇异值是一个数学意义上的概念，一般是由奇异值分解（Singular Value Decomposition，简称SVD分解）得到。如果要问奇异值表示什么物理意义，那么就必须考虑在不同的实际工程应用中奇异值所对应的含义。下面先尽量避开严格的数学符号推导，直观的从一张图片出发，让我们来看看奇异值代表什么意义。

这是女神上野树里（Ueno Juri）的一张照片，像素为高度450*宽度333。暂停舔屏先（痴汉脸

我们都知道，图片实际上对应着一个矩阵，矩阵的大小就是像素大小，比如这张图对应的矩阵阶数就是450*333，矩阵上每个元素的数值对应着像素值。我们记这个像素矩阵为 A

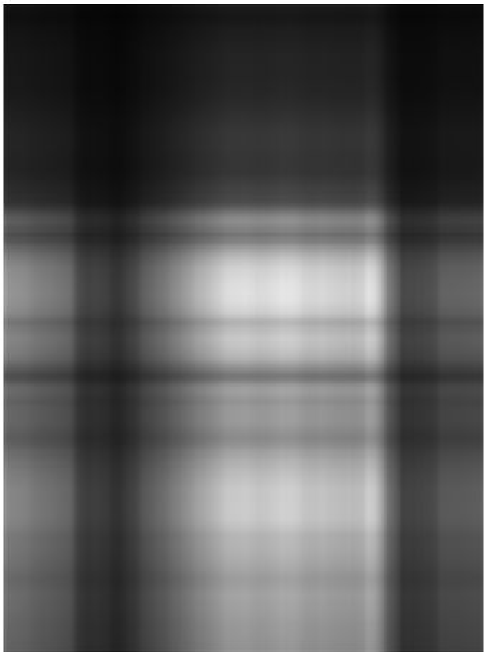
现在我们对矩阵 A 进行奇异值分解。直观上，奇异值分解将矩阵分解成若干个秩一矩阵之和，用公式表示就是：

(1) $$A = \sigma_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}} + \sigma_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + \ldots + \sigma_r u_r v_r^{\mathrm{T}}$$

其中等式右边每一项前的系数 σ 就是奇异值， u 和 v 分别表示列向量，秩一矩阵的意思是矩阵秩为1。注意到每一项 uv^{T} 都是秩为1的矩阵。我们假定奇异值满足 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$ （奇异值大于0是个重要的性质，但这里先别在意），如果不满足的话重新排列顺序即可，这无非是编号顺序的问题。

既然奇异值有从大到小排列的顺序，我们自然要问，如果只保留大的奇异值，舍去较小的奇异值，这样(1)式里的等式自然不再成立，那会得到怎样的矩阵——也就是图像?

令 $A_1 = \sigma_1 u_1$



结果就是完全看不清是啥……我们试着多增加几项进来： $A_5=\sigma_1u_1v_1^{\mathrm{T}}+\sigma_2u_2v_2^{\mathrm{T}}+\sigma_3u_3v_3^{\mathrm{T}}+\sigma_4u_4v_4^{\mathrm{T}}+\sigma_5u_5v_5^{\mathrm{T}}$ ，再作图

隐约可以辨别这是短发伽椰子的脸……但还是很模糊，毕竟我们只取了5个奇异值而已。下面我们取20个奇异值试试，也就是(1)式等式右边取前20项构成 A_{20}

虽然还有些马赛克般的模糊，但我们总算能辨别出这是Juri酱的脸。当我们取到(1)式等式右边前50项时：

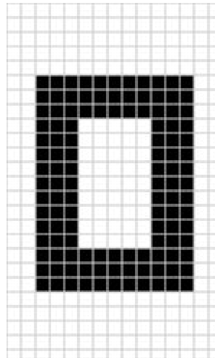
我们得到和原图差别不大的图像。也就是说当 k 从1不断增大时， A_k 不断的逼近 A 。让我们回到公式

(1) $A=\sigma_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}}+\sigma_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}}+\ldots+\sigma_r u_r v_r^{\mathrm{T}}$

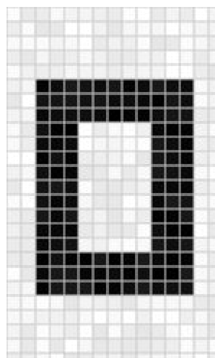
矩阵 A 表示一个450*333的矩阵，需要保存 $450 \times 333 = 149850$ 个元素的值。等式右边 u 和 v 分别是450*1和333*1的向量，每一项有 $1+450+333=784$ 个元素。如果我们要存储很多高清的图片，而又受限于存储空间的限制，在尽可能保证图像可被识别的精度的前提下，我们可以保留奇异值较大的若干项，舍去奇异值较小的项即可。例如在上面的例子中，如果我们只保留奇异值分解的前50项，则需要存储的元素为 $784 \times 50 = 39200$ ，和存储原始矩阵 A 相比，存储量仅为后者的26%。

下面可以回答题主的问题：**奇异值往往对应着矩阵中隐含的重要信息，且重要性和奇异值大小正相关。每个矩阵 A 都可以表示为一系列秩为1的“小矩阵”之和，而奇异值则衡量了这些“小矩阵”对于 A 的权重。**

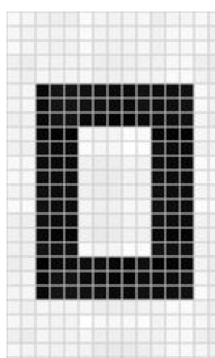
在图像处理领域，奇异值不仅可以应用在数据压缩上，还可以对图像去噪。如果一副图像包含噪声，我们有理由相信那些较小的奇异值就是由于噪声引起的。当我们强行令这些较小的奇异值为0时，就可以去除图片中的噪声。如下是一张25*15的图像（本例来源于[1]）



但往往我们只能得到如下带有噪声的图像（和无噪声图像相比，下图的部分白格子中带有灰色）：



通过奇异值分解，我们发现矩阵的奇异值从大到小分别为：14.15，4.67，3.00，0.21，……，0.05。除了前3个奇异值较大以外，其余奇异值相比之下都很小。强行令这些小奇异值为0，然后只用前3个奇异值构造新的矩阵，得到



可以明显看出噪声减少了（白格子上灰白相间的图案减少了）。

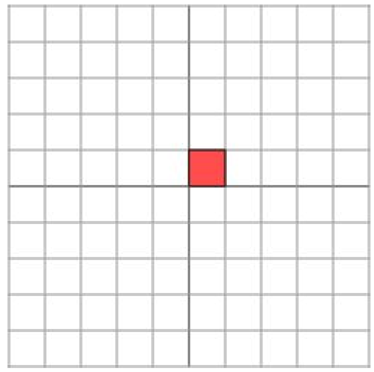
奇异值分解还广泛的用于主成分分析（Principle Component Analysis，简称PCA）和推荐系统（如Netflex的电影推荐系统）等。在这些应用领域，奇异值也有相应的意义。

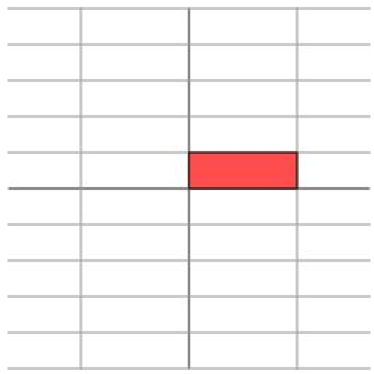
考虑题主在问题描述中的叙述：“把m*n矩阵看作从m维空间到n维空间的一个线性映射，是否：各奇异向量就是坐标轴，奇异值就是对应坐标的系数？”我猜测，题主更想知道的是奇异值在数学上的**几何含义**，而非应用中的**物理意义**。下面简单介绍一下奇异值的几何含义，主要参考文献是美国数学协会网站上的文章[1]。

下面的讨论需要一点点线性代数的知识。线性代数中最让人印象深刻的一点是，要将**矩阵**和空间中的**线性变换**视为同样的事物。比如**对角矩阵** M 作用在任何一个向量上

$$\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3x \\ y \end{bmatrix}$$

其几何意义为在水平 x 方向上拉伸3倍， y 方向保持不变的线性变换。换言之**对角矩阵起到作用是将水平垂直网格作水平拉伸（或者反射后水平拉伸）的线性变换。**

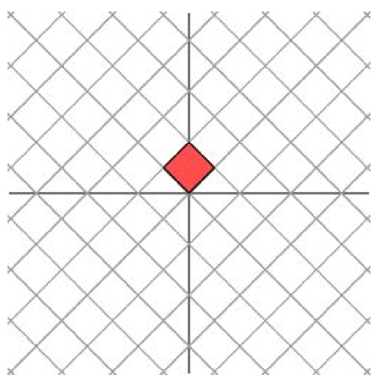


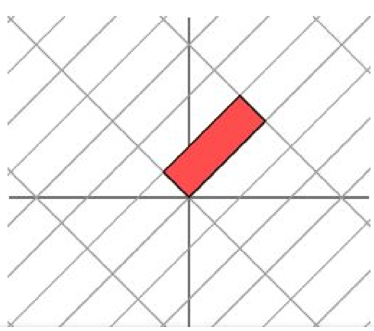


如果 M 不是对角矩阵，而是一个**对称矩阵**

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

那么，**我们也总可以找到一组网格线，使得矩阵作用在该网格上仅仅表现为（反射）拉伸变换，而没有旋转变换**

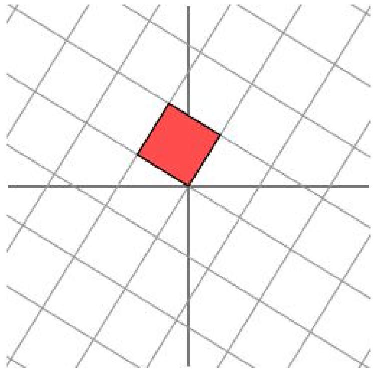


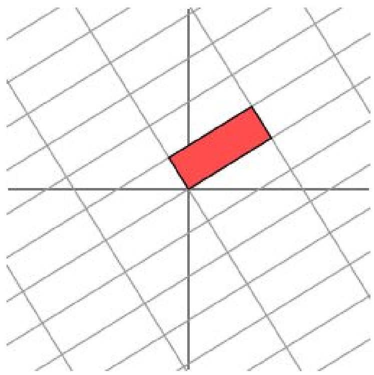


考虑更一般的**非对称矩阵**

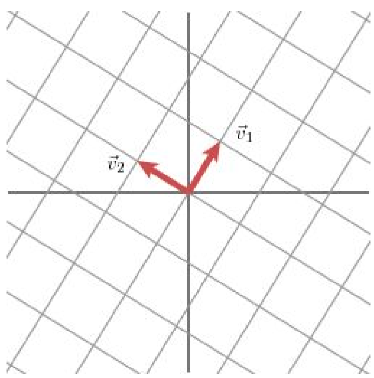
$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

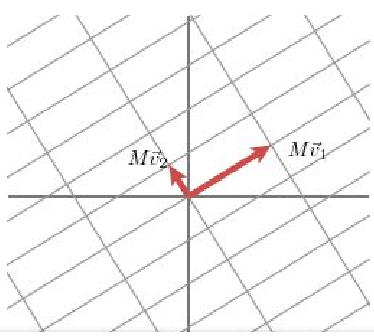
很遗憾，此时我们再也找不到一组网格，使得矩阵作用在该网格上之后只有拉伸变换（找不到背后的数学原因是对一般非对称矩阵无法保证在实数域上可对角化，不明白也不要在意）。我们退求其次，找一组网格，使得矩阵作用在该网格上之后允许有**拉伸变换**和**旋转变换**，但要保证变换后的网格依旧互相垂直。这是可以做到的





下面我们就可以自然过渡到奇异值分解的引入。**奇异值分解的几何含义为：对于任何的一个矩阵，我们要找到一组两两正交单位向量序列，使得矩阵作用在此向量序列上后得到新的向量序列保持两两正交。**下面我们要说明的是，**奇异值的几何含义为：这组变换后的新的向量序列的长度。**





当矩阵 M 作用在正交单位向量 v_1 和 v_2 上之后，得到 Mv_1 和 Mv_2 也是正交的。令 u_1 和 u_2 分别是 Mv_1 和 Mv_2 方向上的单位向量，即 $Mv_1 = \sigma_1 u_1$ ， $Mv_2 = \sigma_2 u_2$ ，写在一起就是 $M[v_1 \quad v_2] = [\sigma_1 u_1 \quad \sigma_2 u_2]$ ，整理得：

$$M = M[v_1 \quad v_2]\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = [\sigma_1 u_1 \quad \sigma_2 u_2]\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = [u_1 \quad u_2]\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

这样就得到矩阵 M 的奇异值分解。**奇异值 σ_1 和 σ_2 分别是 Mv_1 和 Mv_2 的长度。**很容易可以把结论推广到一般 n 维情形。

下面给出一个**更简洁更直观的奇异值的几何意义**（参见[2]）。先来一段线性代数的推导，不想看也可以略过，直接看黑体字几何意义部分：

假设矩阵 A 的奇异值分解为

$$A = [u_1 \quad u_2]\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

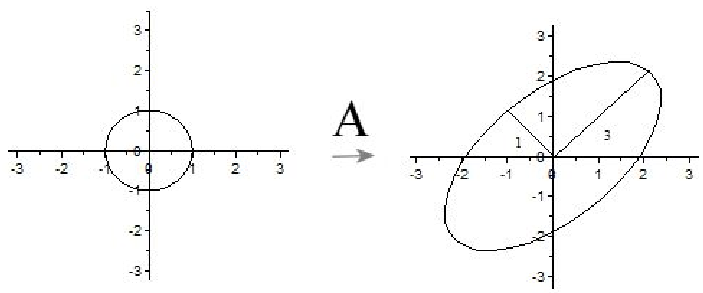
其中 u_1, u_2, v_1, v_2 是二维平面的向量。根据奇异值分解的性质， u_1, u_2 线性无关， v_1, v_2 线性无关。那么对二维平面上任意的向量 x ，都可以表示为： $x = \xi_1 v_1 + \xi_2 v_2$ 。

当 A 作用在 x 上时，

$$y = Ax = A[v_1 \quad v_2]\begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = [u_1 \quad u_2]\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}} \\ v_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}[v_1 \quad v_2]\begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = 3\xi_1 u_1 + \xi_2 u_2$$

令 $\eta_1 = 3\xi_1, \eta_2 = \xi_2$ ，我们可以得出结论：如果 x 是在单位圆 $\xi_1^2 + \xi_2^2 = 1$ 上，那么 y 正好在椭圆 $\eta_1^2/3^2 + \eta_2^2/1^2 = 1$ 上。这表明：**矩阵 A 将二维平面中单位圆变换成椭圆，而两个奇异值正好是椭圆的两个半轴长**，长轴所在的直线是 $\mathrm{span}\{u_1\}$ ，短轴所在的直线是 $\mathrm{span}\{u_2\}$.

推广到一般情形：一般矩阵 A 将单位球 $\|x\|_2 = 1$ 变换为超椭球面 $E_m = \{y \in \mathbf{C}^m : y = Ax, x \in \mathbf{C}^n, \|x\|_2 = 1\}$ ，那么矩阵 A 的每个奇异值恰好就是超椭球的每条半轴长度。



[郑宁：人们是如何想到奇异值分解的？](#)

参考文献：

[1] We Recommend a Singular Value Decomposition（Feature Column from the AMS）

[2] 徐树方，《矩阵计算的理论与方法》，北京大学出版社。

编辑于 2017-12-30

奇异值的物理意义是什么?

矩阵奇异值的物理意义是什么?
或者说，奇异值形象一点的意义是什么?

把m*n矩阵看作从m维空间到n维空间的一个线性映射，
是否：
各奇异向量就是坐标轴，奇异值就是对应坐标的系数?

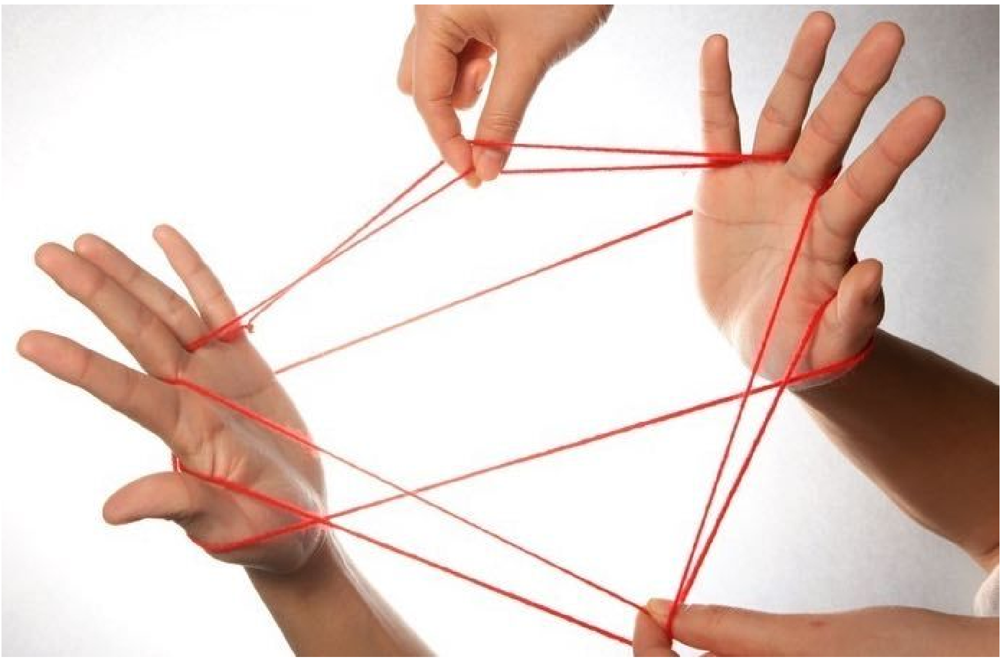
（题目可能问得不好，欢迎帮忙修改）

马同学
看图学数学，公众号：matongxue314

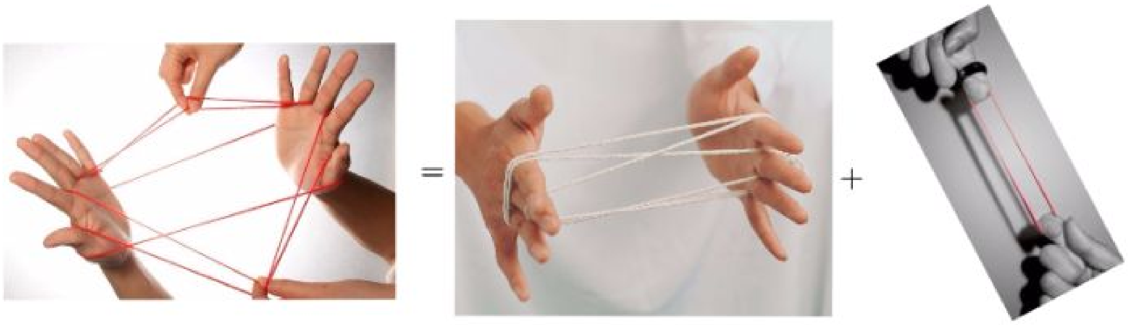
让我们从小时候玩过的翻绳游戏开始这个问题的讲解。

1 翻绳

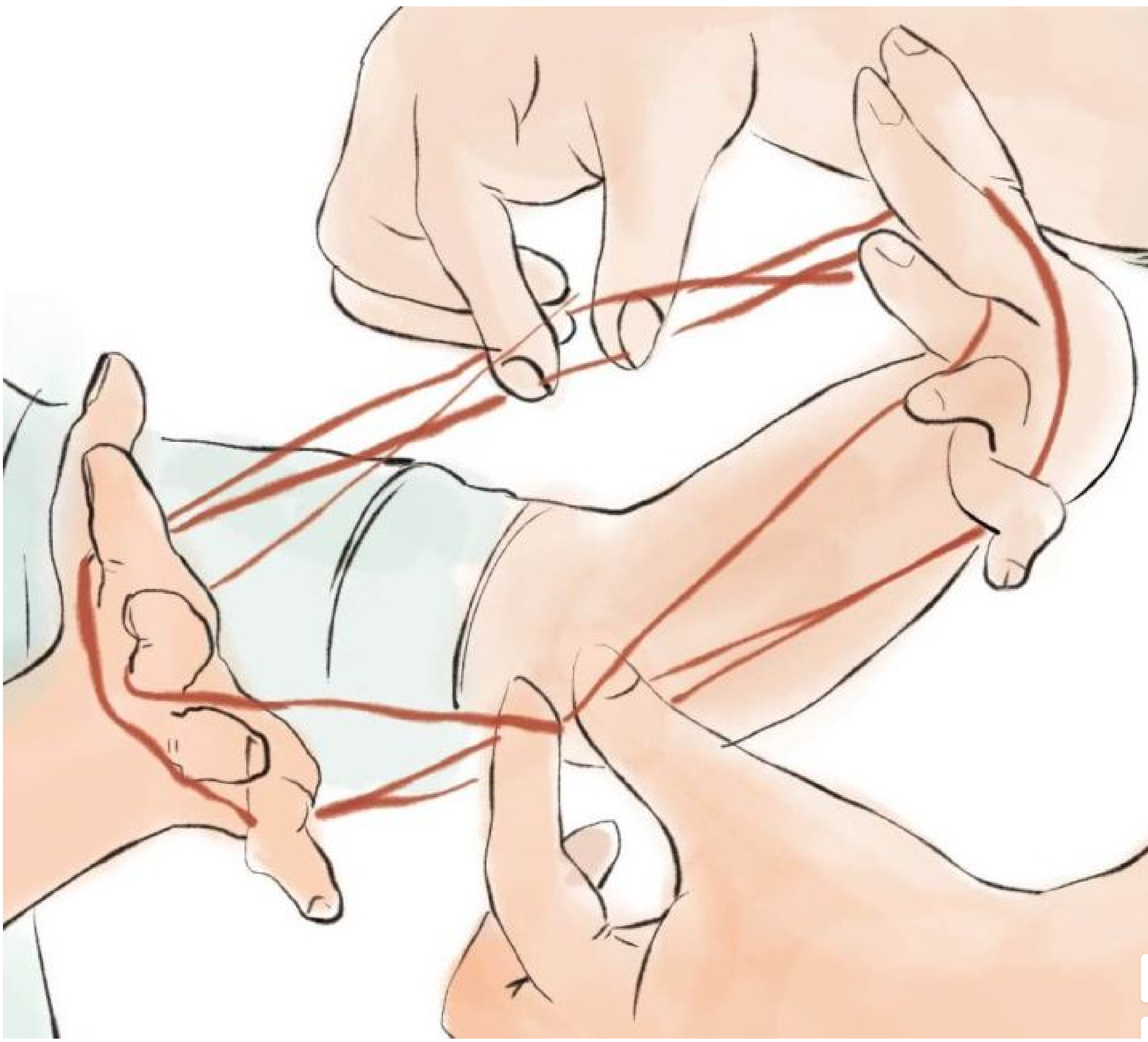
对于翻绳的这个花型而言，是由四只手完成的：



我们可以认为这个花型是由两个方向的力合成的：



容易想象，如果其中一个力（相比另外一个力而言）比较小的话，那么绳子的形状基本上由大的那个力来决定：



2 奇异值分解与奇异值

类比于翻绳，我们可以认为：

- 奇异值分解，就是把矩阵分成多个“分力”
- 奇异值的大小，就是各个“分力”的大小

2.1 奇异值分解

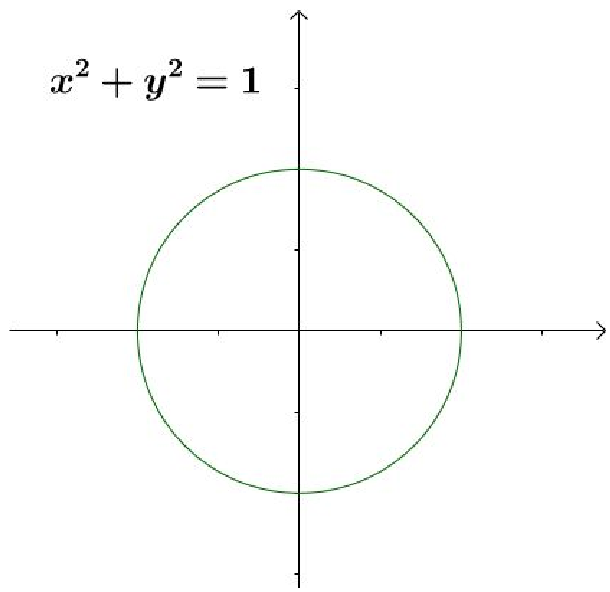
下面通过一个具体的矩阵例子来解释下，比如：

$$A=\begin{bmatrix}1 & -2\\ 1 & 2\end{bmatrix}$$

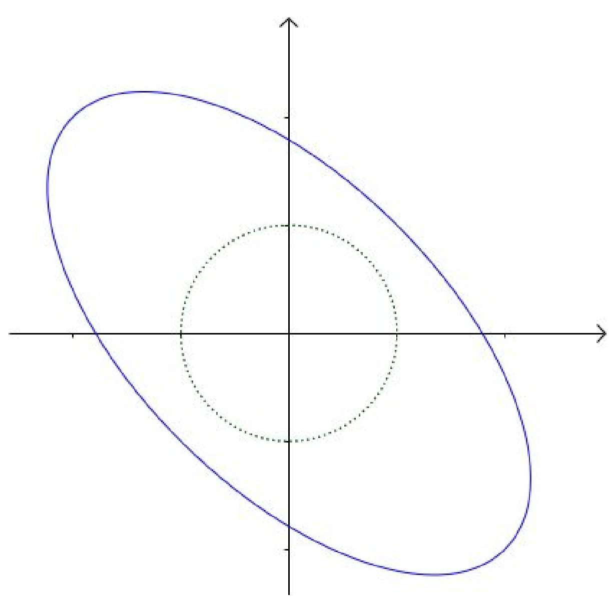
根据之前的类比，矩阵是“力”，“力”怎么画出来呢？

翻绳游戏中的“力”要通过绳子的形状来观察。很显然要观察矩阵也需要一个载体。

我们通过单位圆来观察矩阵：



把这个单位圆的每一点都通过 A 进行变换，得到一个椭圆（我把单位圆保留下来了，作为一个比较）：



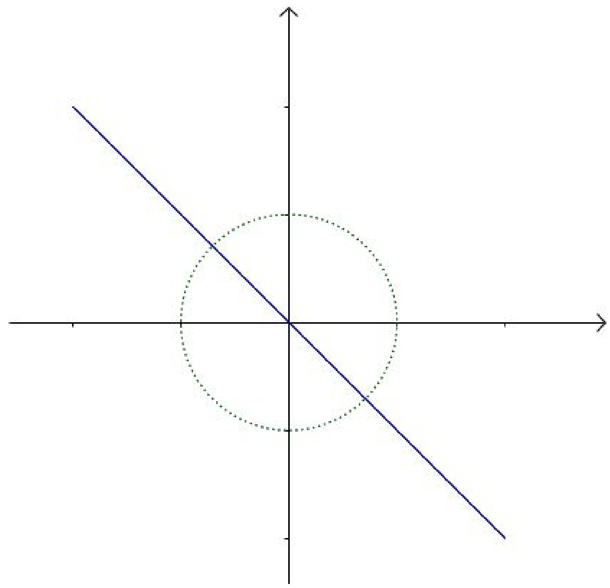
对 A 进行奇异值分解：

$$A=\begin{bmatrix}1 & -2\\1 & 2\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}-0.707 & -0.707\\0.707 & -0.707\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2.828 & 0\\0 & 1.414\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}$$

实际上，将 A 分为了两个“分力”：

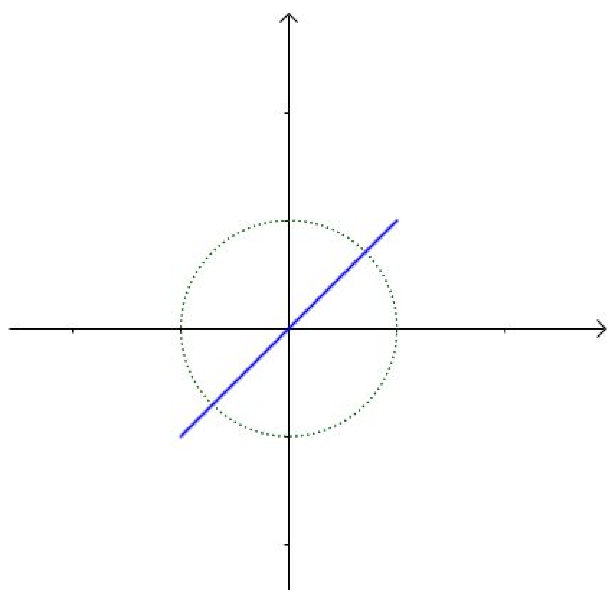
$$A=\begin{bmatrix}-0.707 & -0.707\\0.707 & -0.707\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2.828 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-0.707 & -0.707\\0.707 & -0.707\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 1.414\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}$$

我们来看看第一个“分力” $\begin{bmatrix}-0.707 & -0.707\\0.707 & -0.707\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2.828 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & -2\\0 & 2\end{bmatrix}$ ，作用在单位圆这个“橡皮筋”上的效果：



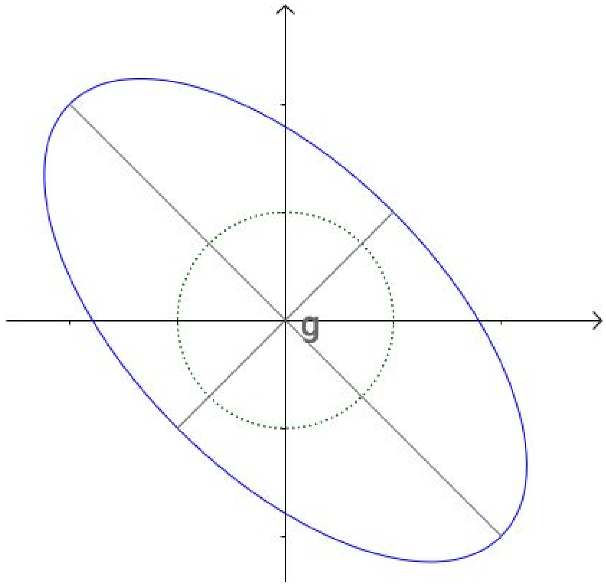
可怜的“橡皮筋”被拉成了一根线段。

我们来看看第二个“分力” $\begin{bmatrix}-0.707 & -0.707\\0.707 & -0.707\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 0\\0 & 1.414\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\1 & 0\end{bmatrix}$ ，作用在单位圆这个“橡皮筋”上的效果：



可怜的“橡皮筋”被拉成了另外一根线段。

这两个“分力”一起作用的时候，可以想象（画面自行脑补），单位圆这个“橡皮筋”被拉成了椭圆：



2.2 奇异值的大小

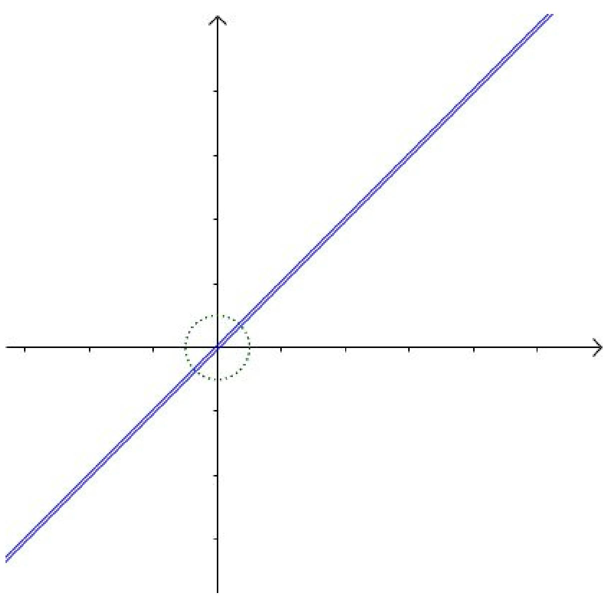
刚才举的矩阵的两个“分力”大小，只相差一倍，如果相差很大会怎么样?

换一个矩阵 A ，对它进行奇异值分解：

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -0.689 & -0.725 \\ -0.725 & 0.689 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.051 & 0 \\ 0 & 0.048 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0.689 & -0.725 \\ -0.725 & 0.689 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

这两个“分力”的奇异值相差就很大，大概相差了40倍。

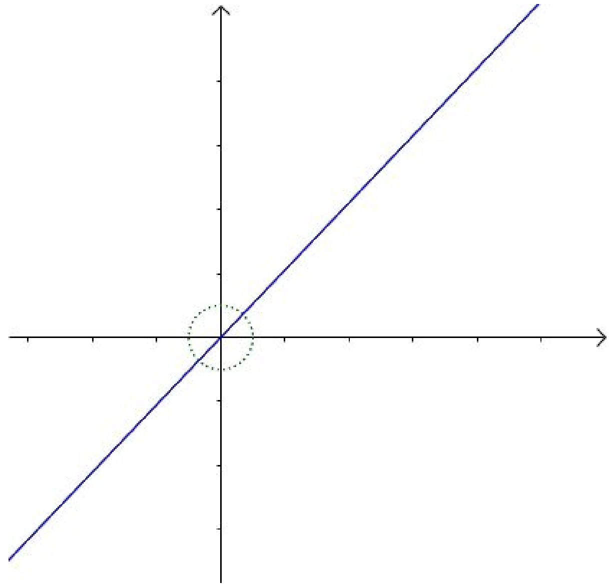
单位圆被 A 映射成了短轴和长轴相差太大的椭圆，看起来和直线差不多：



我们试试，把小的那个奇异值去掉会怎么样：

$$\begin{aligned} A &\approx \begin{bmatrix} -0.689 & -0.725 \\ -0.725 & 0.689 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.051 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0.689 & -0.725 \\ -0.725 & 0.689 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.974 & 1.024 \\ 1.024 & 1.076 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$\begin{bmatrix} 0.974 & 1.024 \\ 1.024 & 1.076 \end{bmatrix}$ 把单位圆变为了一根直线：



这个直线和之前的椭圆看上去差不多。

回到之前的比喻，两个相差很大的分力作用在"橡皮筋"上，"橡皮筋"的形状可以说完全取决于大的那个分力。

2.3 奇异值为什么这么神奇?

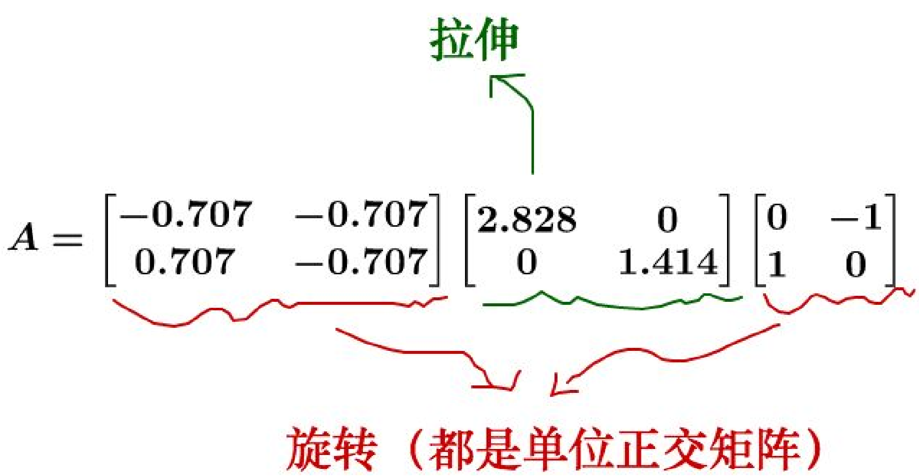
奇异值分解实际上把矩阵的变换分为了三部分：

- 旋转
- 拉伸
- 投影

拿刚才的：

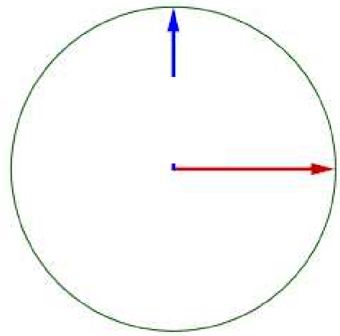
$$A=\begin{bmatrix}1 & -2\\1 & 2\end{bmatrix}$$

举例子（方阵没有投影，不过不影响这里思考）：



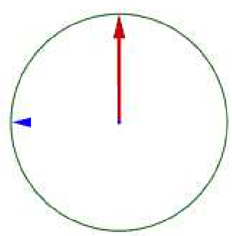
单位圆先被旋转，是没有形变的：

$$\text{先作用}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

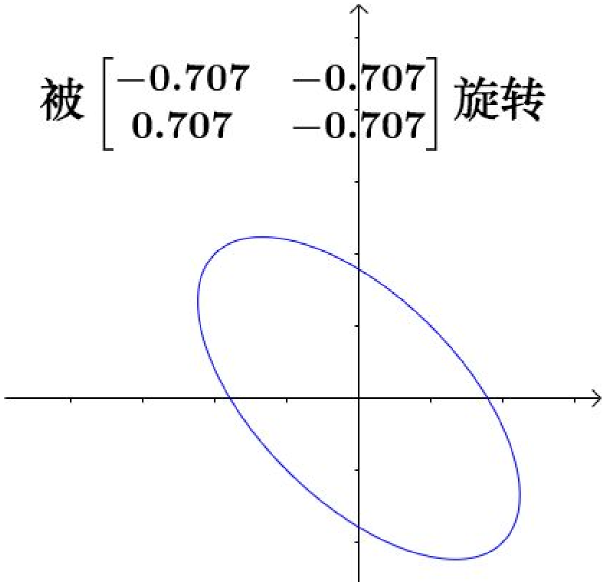


再进行拉伸，这里决定了单位圆的形状，奇异值分别是椭圆的长轴和短轴：

$$\text{再作用}\begin{bmatrix}2.828 & 0\\ 0 & 1.414\end{bmatrix}$$



最后，被旋转到最终的位置，这一过程也没有发生形变：

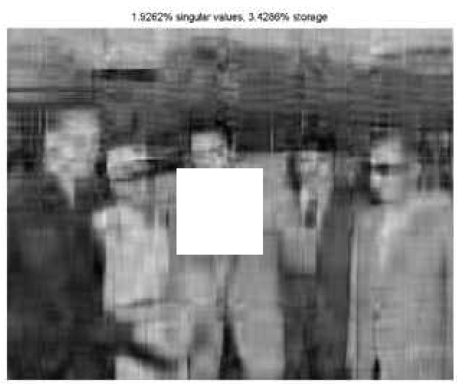


所以，奇异值决定了形变，大小决定在形变中的重要性。

3 总结

根据奇异值分解、以及奇异值的特点，有很多应用。

比如，可以把图片转为矩阵，通过丢弃不重要的奇异值，进行压缩：



比如，可以把很多数据放在矩阵中，通过丢弃不重要的奇异值，来减小处理量。

还比如，可以从矩阵中，找到最大的奇异值，从而得到数据最重要的特征。

编辑于 2017-09-04

602 44 条评论 分享 收藏 感谢 ··· 收起