# 奇异值分解(SVD)原理与在降维中的应用

奇异值分解(Singular Value Decomposition，以下简称SVD)是在机器学习领域广泛应用的算法，它不光可以用于降维算法中的特征分解，还可以用于推荐系统，以及自然语言处理等领域。是很多机器学习算法的基石。本文就对SVD的原理做一个总结，并讨论在在PCA降维算法中是如何运用运用SVD的。

# 1. 回顾特征值和特征向量

我们首先回顾下特征值和特征向量的定义如下：

$$Ax = \lambda x$$
Ax=λx

其中A是一个$n \times n$的实对称矩阵，$x$是一个$n$维向量，则我们说$\lambda$是矩阵A的一个特征值，而$x$是矩阵A的特征值$\lambda$所对应的特征向量。

求出特征值和特征向量有什么好处呢？ 就是我们可以将矩阵A特征分解。如果我们求出了矩阵A的$n$个特征值$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n$,以及这$n$个特征值所对应的特征向量$\{w_1, w_2, ... w_n\}$，，如果这$n$个特征向量线性无关，那么矩阵A就可以用下式的特征分解表示：

$$A = W\Sigma W^{-1}$$
A=WΣW−1

其中W是这$n$个特征向量所张成的$n \times n$维矩阵，而$\Sigma$为这n个特征值为主对角线的$n \times n$维矩阵。

一般我们会把W的这$n$个特征向量标准化，即满足$||w_i||_2 = 1$，或者说$w_i^T w_i = 1$，此时W的$n$个特征向量为标准正交基，满足$W^TW = I$，即$W^T = W^{-1}$，也就是说W为酉矩阵。

这样我们的特征分解表达式可以写成

$$A = W\Sigma W^T$$
A=WΣWT

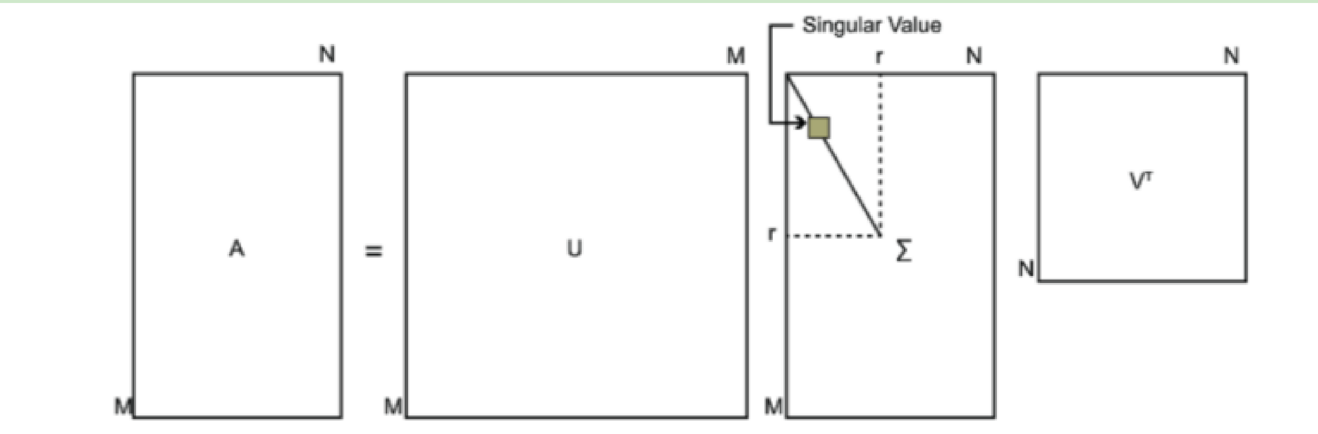
注意到要进行特征分解，矩阵A必须为方阵。那么如果A不是方阵，即行和列不相同时，我们还可以对矩阵进行分解吗？答案是可以，此时我们的SVD登场了。

# 2. SVD的定义

SVD也是对矩阵进行分解，但是和特征分解不同，SVD并不要求要分解的矩阵为方阵。假设我们的矩阵A是一个$m \times n$的矩阵，那么我们定义矩阵A的SVD为：

$$A = U\Sigma V^T$$
A=UΣVT

其中U是一个$m \times m$的矩阵，$\Sigma$是一个$m \times n$的矩阵，除了主对角线上的元素以外全为0，主对角线上的每个元素都称为奇异值，V是一个$n \times n$的矩阵。U和V都是酉矩阵，即满足$U^TU = I, V^TV = I$。下图可以很形象的看出上面SVD的定义：




那么我们如何求出SVD分解后的$U, \Sigma, V$这三个矩阵呢？

如果我们将A的转置和A做矩阵乘法，那么会得到$n \times n$n×n的一个方阵$A^TA$ATA。既然$A^TA$ATA是方阵，那么我们就可以进行特征分解，得到的特征值和特征向量满足下式：

$$(A^TA)v_i = \lambda_i v_i$$
(ATA)vi=λivi

这样我们就可以得到矩阵$A^TA$ATA的n个特征值和对应的n个特征向量$v$v了。将$A^TA$ATA的所有特征向量张成一个$n \times n$n×n的矩阵V，就是我们SVD公式里面的V矩阵了。一般我们将V中的每个特征向量叫做A的右奇异向量。

如果我们将A和A的转置做矩阵乘法，那么会得到$m \times m$m×m的一个方阵$AA^T$AAT。既然$AA^T$AAT是方阵，那么我们就可以进行特征分解，得到的特征值和特征向量满足下式：

$$(AA^T)u_i = \lambda_i u_i$$
(AAT)ui=λiui

这样我们就可以得到矩阵$AA^T$AAT的m个特征值和对应的m个特征向量$u$u了。将$AA^T$AAT的所有特征向量张成一个$m \times m$m×m的矩阵U，就是我们SVD公式里面的U矩阵了。一般我们将U中的每个特征向量叫做A的左奇异向量。

U和V我们都求出来了，现在就剩下奇异值矩阵$\Sigma$Σ没有求出了。由于$\Sigma$Σ除了对角线上是奇异值其他位置都是0，那我们只需要求出每个奇异值$\sigma$σ就可以了。

我们注意到：

$$A = U\Sigma V^T \Rightarrow AV = U\Sigma V^TV \Rightarrow AV = U\Sigma \Rightarrow Av_i = \sigma_i u_i \Rightarrow \sigma_i = Av_i/u_i$$
A=UΣVT⇒AV=UΣVTV⇒AV=UΣ⇒Avi=σiui⇒σi=Avi/ui

这样我们可以求出我们的每个奇异值，进而求出奇异值矩阵$\Sigma$Σ。

上面还有一个问题没有讲，就是我们说$A^TA$ATA的特征向量组成的就是我们SVD中的V矩阵，而$AA^T$AAT的特征向量组成的就是我们SVD中的U矩阵，这有什么根据吗？这个其实很容易证明，我们以V矩阵的证明为例。

$$A = U\Sigma V^T \Rightarrow A^T = V\Sigma^TU^T \Rightarrow A^TA = V\Sigma^TU^TU\Sigma V^T = V\Sigma^2V^T$$
A=UΣVT⇒AT=VΣTUT⇒ATA=VΣTUTUΣVT=VΣ2VT

上式证明使用了:$U^TU = I, \Sigma^T\Sigma = \Sigma^2$。UTU=I,ΣTΣ=Σ2。可以看出$A^TA$ATA的特征向量组成的的确就是我们SVD中的V矩阵。类似的方法可以得到$AA^T$AAT的特征向量组成的就是我们SVD中的U矩阵。

进一步我们还可以看出我们的特征值矩阵等于奇异值矩阵的平方，也就是说特征值和奇异值满足如下关系：

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$$
σi=λi

这样也就是说，我们可以不用$\sigma_i = Av_i/u_i$σi=Avi/ui来计算奇异值，也可以通过求出$A^TA$ATA的特征值取平方根来求奇异值。

# 3. SVD计算举例

这里我们用一个简单的例子来说明矩阵是如何进行奇异值分解的。我们的矩阵A定义为：

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
A=(011110)

我们首先求出$A^TA$ATA和$AA^T$AAT

$$\mathbf{A^TA} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$
ATA=(011110)(011110)=(2112)

$$\mathbf{AA^T} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$
AAT=(011110)(011110)=(110121011)

进而求出$A^TA$ATA的特征值和特征向量：

$$\lambda_1 = 3; v_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}; \lambda_2 = 1; v_2 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
λ1=3;v1=(1/21/2);λ2=1;v2=(−1/21/2)

接着求$AA^T$AAT的特征值和特征向量：

$$\lambda_1 = 3; u_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{pmatrix}; \lambda_2 = 1; u_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}; \lambda_3 = 0; u_3 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$
λ1=3;u1=(1/62/61/6);λ2=1;u2=(1/20−1/2);λ3=0;u3=(1/3−1/31/3)

利用$Av_i = \sigma_i u_i, i = 1, 2$Avi=σiui,i=1,2求奇异值：

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \sigma_1 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_1 = \sqrt{3}$$
(011110)(1/21/2)=σ1(1/62/61/6)⇒σ1=3

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \sigma_2 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_2 = 1$$
(011110)(−1/21/2)=σ2(1/20−1/2)⇒σ2=1

当然，我们也可以用$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$σi=λi直接求出奇异值为$\sqrt{3}$3和1.

最终得到A的奇异值分解为：

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \\ 2/\sqrt{6} & 0 & -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
A=UΣVT=(1/61/21/32/60−1/31/6−1/21/3)(300100)(1/21/2−1/21/2)

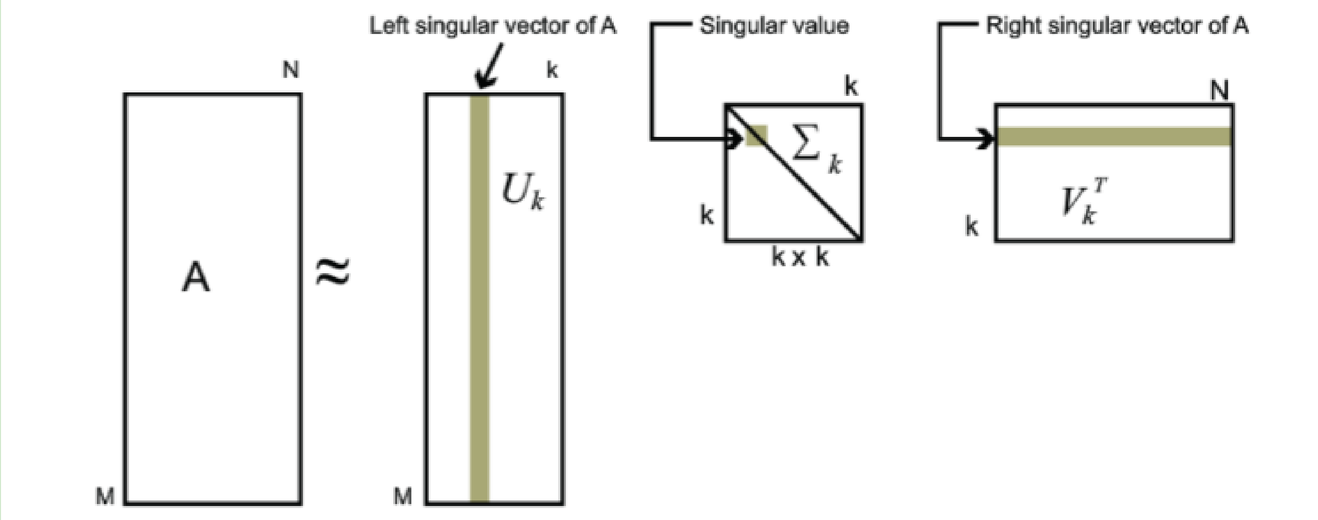
# 4. SVD的一些性质

上面几节我们对SVD的定义和计算做了详细的描述，似乎看不出我们费这么大的力气做SVD有什么好处。那么SVD有什么重要的性质值得我们注意呢?

对于奇异值,它跟我们特征分解中的特征值类似，在奇异值矩阵中也是按照从大到小排列，而且奇异值的减少特别的快，在很多情况下，前10%甚至1%的奇异值的和就占了全部的奇异值之和的99%以上的比例。也就是说，我们也可以用最大的k个的奇异值和对应的左右奇异向量来近似描述矩阵。也就是说：

$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V^T_{n\times n} \approx U_{m\times k}\Sigma_{k\times k}V^T_{k\times n}$$
Am×n=Um×mΣm×nVn×nT≈Um×kΣk×kVk×nT

其中k要比n小很多，也就是一个大的矩阵A可以用三个小的矩阵$U_{m\times k}, \Sigma_{k\times k}, V^T_{k\times n}$Um×k,Σk×k,Vk×nT来表示。如下图所示，现在我们的矩阵A只需要灰色的部分的三个小矩阵就可以近似描述了。




由于这个重要的性质，SVD可以用于PCA降维，来做数据压缩和去噪。也可以用于推荐算法，将用户和喜好对应的矩阵做特征分解，进而得到隐含的用户需求来做推荐。同时也可以用于NLP中的算法，比如潜在语义索引（LSI）。下面我们就对SVD用于PCA降维做一个介绍。

# 5. SVD用于PCA

在主成分分析（PCA）原理总结中，我们讲到要用PCA降维，需要找到样本协方差矩阵$X^TX$XTX的最大的d个特征向量，然后用这最大的d个特征向量张成的矩阵来做低维投影降维。可以看出，在这个过程中需要先求出协方差矩阵$X^TX$XTX，当样本数多样本特征数也多的时候，这个计算量是很大的。

注意到我们的SVD也可以得到协方差矩阵$X^TX$XTX最大的d个特征向量张成的矩阵，但是SVD有个好处，有一些SVD的实现算法可以不求先求出协方差矩阵$X^TX$XTX，也能求出我们的右奇异矩阵$V$V。也就是说，我们的PCA算法可以不用做特征分解，而是做SVD来完成。这个方法在样本量很大的时候很有效。实际上，scikit-learn的PCA算法的背后真正的实现就是用的SVD，而不是我们我们认为的暴力特征分解。

另一方面，注意到PCA仅仅使用了我们SVD的右奇异矩阵，没有使用左奇异矩阵，那么左奇异矩阵有什么用呢?

假设我们的样本是$m \times n$m×n的矩阵X，如果我们通过SVD找到了矩阵$XX^T$XXT最大的d个特征向量张成的$m \times d$m×d维矩阵U，则我们如果进行如下处理：

$$X'_{d\times n} = U^T_{d\times m} X_{m\times n}$$

Xd×n′=Ud×mTXm×n

可以得到一个$d \times n$d×n的矩阵X‘,这个矩阵和我们原来的$m \times n$m×n维样本矩阵X相比，行数从m减到了d，可见对行数进行了压缩。也就是说，左奇异矩阵可以用于行数的压缩。相对的，右奇异矩阵可以用于列数即特征维度的压缩，也就是我们的PCA降维。

# 6. SVD小结

SVD作为一个很基本的算法，在很多机器学习算法中都有它的身影，特别是在现在的大数据时代，由于SVD可以实现并行化，因此更是大展身手。SVD的原理不难，只要有基本的线性代数知识就可以理解，实现也很简单因此值得仔细的研究。当然，SVD的缺点是分解出的矩阵解释性往往不强，有点黑盒子的味道，不过这不影响它的使用。