奇异值分解（SVD）

Author: [漫漫成长]

Link: [https://zhuanlan.zhihu.com/p/29846048]

以下内容来自http://www.cnblogs.com/pinard/Pinard-博客园的学习笔记，总结如下：

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

首先回顾下特征值和特征向量的定义如下：

$Ax = \lambda x$

其中 A 是一个 $n \times n$ 矩阵， x 是一个 n 维向量，则 λ 是矩阵 A 的一个特征值，而 x 是矩阵 A 的特征值 λ 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 $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$ ，以及这 n 个特征值所对应的特征向量 $w_1, w_2, \ldots, w_n$ ，

那么矩阵A就可以用下式的特征分解表示：

$$A = W\Sigma W^{-1}$$

其中W是这n个特征向量所张成的n×n维矩阵，而Σ为这n个特征值为主对角线的n×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 $w_i^T w_i = 1$ ，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

$$A = W\Sigma W^T$$

注意到要进行特征分解，矩阵A必须为方阵。

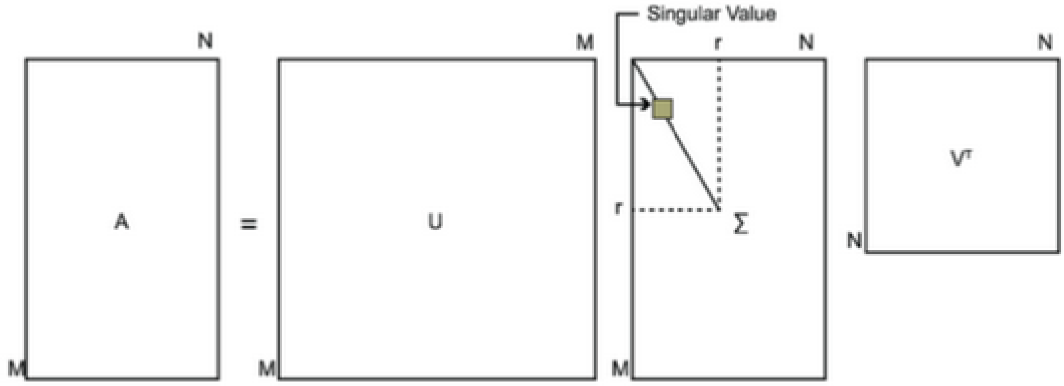
那么如果A不是方阵，即行和列不相同时，我们还可以对矩阵进行分解吗？答案是可以，此时我们的SVD登场了。

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×n的矩阵，那么我们定义矩阵A的SVD为：

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

其中 U 是一个 $m \times m$ 的矩阵， Σ 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,Σ,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×n的一个方阵 A^TA 。既然 A^TA 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：

$$(A^TA)v_i = \lambda_i v_i$$

这样我们就可以得到矩阵 A^TA 的n个特征值和对应的n个特征向量v了。将 A^TA 的所有特征向量张成一个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×m的一个方阵 AA^T 。既然 AA^T 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：

$$(AA^T)u_i = \lambda_i u_i$$

这样我们就可以得到矩阵 AA^T 的m个特征值和对应的m个特征向量u了。将 AA^T 的所有特征向量张成一个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Σ没有求出了.

由于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:

$$A = U\Sigma V^T \Rightarrow AV = U\Sigma V^TV \Rightarrow AV = U\Sigma \Rightarrow Av_i = \sigma_i u_i \Rightarrow \sigma_i = Av_i / u_i$$

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Σ。

上面还有一个问题没有讲，就是我们说 A^TA 的特征向量组成的就是我们SVD中的V矩阵，而

AA^T 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。

$$A = U\Sigma V^T \Rightarrow A^T = V\Sigma U^T \Rightarrow A^TA = V\Sigma U^TU\Sigma V^T = V\Sigma^2V^T$$

上式证明使用了 $U^U = I, \Sigma^T = \Sigma$ 。可以看出 A^TA 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 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：

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$$

这样也就是说，我们可以不用 $\sigma_i = \frac{Av_i}{u_i}$ 来计算奇异值，也可以通过求出 A^TA 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：

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

首先求出 A^TA 和 AA^T

$$\mathbf{A^TA} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{AA^T} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

进而求出 A^TA 的特征值和特征向量：

$$\lambda_1 = 3; v_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}; \lambda_2 = 1; v_2 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

接着求出 AA^T 的特征值和特征向量：

$$\lambda_1 = 3; u_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{pmatrix}; \lambda_2 = 1; u_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}; \lambda_3 = 0; u_3 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

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

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \sigma_1 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_1 = \sqrt{3}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \sigma_2 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_2 = 1$$

也可以用 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ 直接求出奇异值为 $\sqrt{3}$ 和1.

最终得到A的奇异值分解为：

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \\ 2/\sqrt{6} & 0 & -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

4. SVD的一些性质

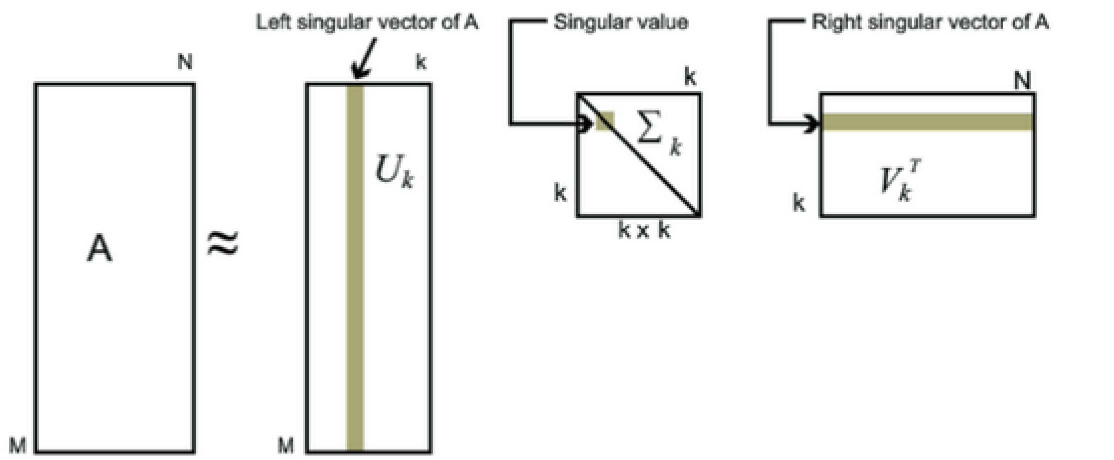
对于奇异值,它跟我们特征分解中的特征值类似，在奇异值矩阵中也是按照从大到小排列，而且奇异值的减少特别的快，在很多情况下，前10%甚至1%的奇异值的和就占了全部的奇异值之和的99%以上的比例。

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：

$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V^T_{n\times n} \approx U_{m\times k}\Sigma_{k\times k}V^T_{k\times n}$$

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 $U_{m\times k}, \sum_{k\times k}, V^T_{k\times n}$ 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

PCA降维，需要找到样本协方差矩阵 X^TX 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 ，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 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 ，也能求出我们的右奇异矩阵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×n的矩阵X，如果我们通过SVD找到了矩阵 XX^T 最大的d个特征向量张成的m×d维矩阵U，则我们如果进行如下处理：

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

可以得到一个d×n的矩阵X‘,这个矩阵和我们原来的m×n维样本矩阵X相比，行数从m减到了k，可见对行数进行了压缩。

左奇异矩阵可以用于行数的压缩。

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。