

12

Cholesky Decomposition

Cholesky 分解

获取列向量空间位置坐标



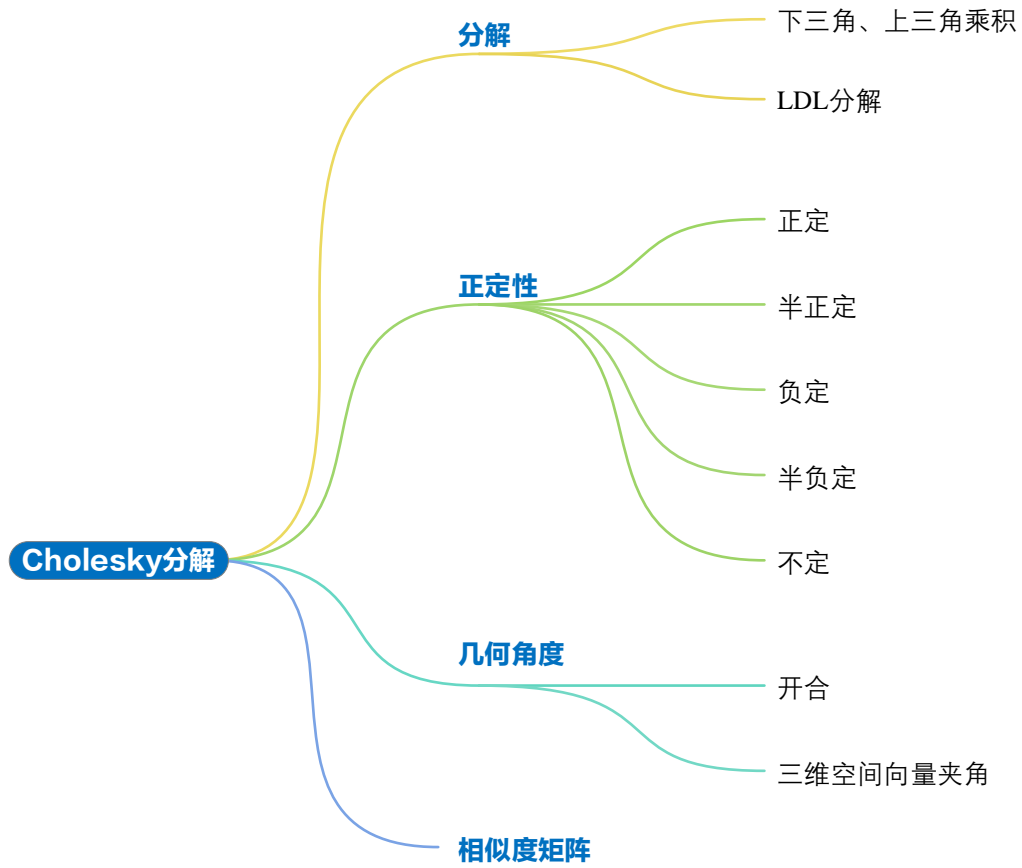
每个人都是天才。但是，如果你以爬树的能力来判断一条鱼，那么那条鱼终其一生都会认为自己愚蠢无能。

Everybody is a genius. But if you judge a fish by its ability to climb a tree, it will live its whole life believing that it is stupid.

—— 阿尔伯特·爱因斯坦 (Albert Einstein) | 理论物理学家 | 1879 ~ 1955



- ◀ `ax.contour3D()` 绘制三维曲面等高线
- ◀ `ax.plot_wireframe()` 绘制线框图
- ◀ `math.radians()` 将角度转换成弧度
- ◀ `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制平面等高线
- ◀ `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制平面填充等高线
- ◀ `matplotlib.pyplot.plot()` 绘制线图
- ◀ `matplotlib.pyplot.quiver()` 绘制箭头图
- ◀ `matplotlib.pyplot.scatter()` 绘制散点图
- ◀ `numpy.arccos()` 反余弦
- ◀ `numpy.cos()` 计算余弦值
- ◀ `numpy.deg2rad()` 将角度转化为弧度
- ◀ `numpy.linalg.cholesky()` Cholesky 分解
- ◀ `numpy.linalg.eig()` 特征值分解



12.1 Cholesky 分解

实数矩阵的 Cholesky 分解由法国军官、数学家安德烈·路易·科列斯基 (André-Louis Cholesky) 最先发明。科列斯基本人在一战结束前夕战死沙场，Cholesky 分解是由科列斯基的同事在他死后发表的，并以科列斯基的名字命名。

通过上一章学习，大家知道 Cholesky 分解将方阵 A 分解为一个下三角矩阵 L 以及它的转置 L^T 的乘积：

$$A = LL^T \quad (1)$$

定义上三角矩阵 R 为 L^T 的话，(1) 可以写成：

$$A = R^T R \quad (2)$$

LDL 分解

在 Cholesky 分解基础上，上一章又介绍了 LDL 分解。LDL 分解，将上述矩阵 A 分解成下三角矩阵 L 、对角阵方阵 D 、 L^T 三者乘积，即，

$$A = LDL^T \quad (3)$$

注意，(3) 中下三角矩阵 L 为对角线元素均为 1。

假设对角方阵 D 对角线元素非负，LDL 分解可以进一步写成：

$$A = LD^{1/2} (D^{1/2})^T L^T = LD^{1/2} (LD^{1/2})^T \quad (4)$$

$D^{1/2}$ 也是个对角方阵， $D^{1/2}$ 对角线上元素是 D 的对角线元素的非负平方根。

令，

$$B = D^{1/2} \quad (5)$$

(4) 可写成：

$$A = LB(LB)^T \quad (6)$$

用上三角矩阵 R 来替换 L^T ，(6) 可以写成：

$$A = R^T BBR = (BR)^T BR \quad (7)$$

12.2 正定矩阵才可以进行 Cholesky 分解

本书前文提到，并非所有矩阵都可以做 Cholesky 分解，只有**正定矩阵** (positive-definite matrix) 才可以。

方阵 A 为**正定矩阵** (positive definite matrix) 时，需要满足在 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ (\mathbf{x} 为非零列向量) 条件下：

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$$

(8)

注意，正定矩阵的特征值均为正。这一点，本书后续将深入讨论。

几何视角

从几何角度更容易理解正定矩阵，以如下 2×2 矩阵为例：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$$

(9)

定义二元函数 $y = f(x_1, x_2)$ ：

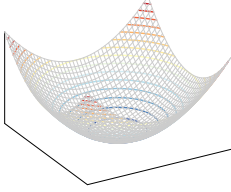
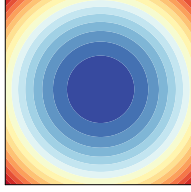
$$\begin{aligned} y &= f(x_1, x_2) \\ &= \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \\ &= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \\ &= ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 \end{aligned}$$

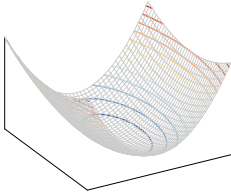
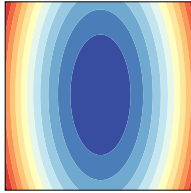
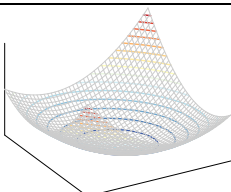
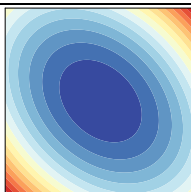
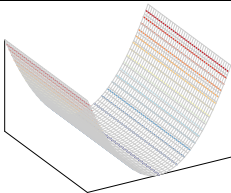
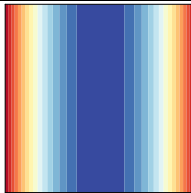
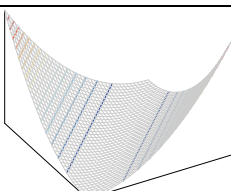
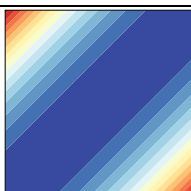
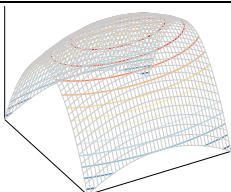
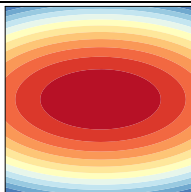
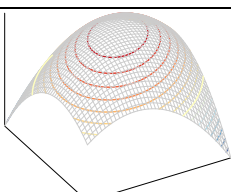
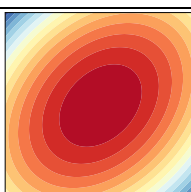
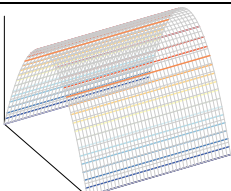
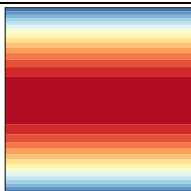
(10)

可以发现函数 $y = f(x_1, x_2)$ 为二次型，这就把正定性和丛书《数学要素》讲过的二次曲面联系起来了。

除了正定矩阵，还有半正定、负定、半负定、不定这几种正定性。表 1 总结几种正定性例子、曲面、等高线特征。希望读者能够通过表中几何图形建立正定性的直观印象，本书后续将专门深入讲解正定性这一概念。

表 1. 几种正定性

正定性	例子	三维曲面	平面等高线
正定 (positive definite)	开口向上正圆抛物面 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$		

	开口向上正椭圆 抛物面 $A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}$		
	开口向上旋转椭圆 抛物面 $A = \begin{bmatrix} 1.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1.5 \end{bmatrix}$		
半正定 (positive semi-definite)	山谷面 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$		
	旋转山谷面 $A = \begin{bmatrix} 0.5 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix}$		
负定 (negative definite)	开口向下正椭圆 抛物面 $A = \begin{bmatrix} -0.5 & 0 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$		
	开口向下旋转椭圆 抛物面 $A = \begin{bmatrix} -1.5 & 0.5 \\ 0.5 & -1.5 \end{bmatrix}$		
半负定 (negative semi-definite)	山脊面 $A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$		

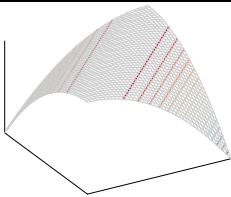
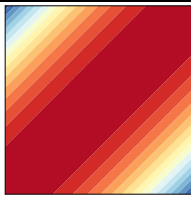
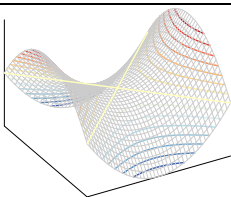
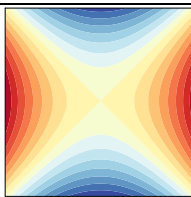
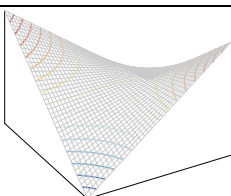
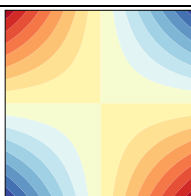
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

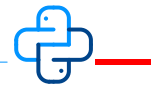
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

	旋转山脊面 $A = \begin{bmatrix} -0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 \end{bmatrix}$		
不定 (indefinite)	马鞍面 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$		
	旋转马鞍面 $A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$		



Bk4_Ch12_01.py 绘制表 1 三维曲面和等高线。请注意改变 a、b、c 三个系数取值。

```
# Bk4_Ch12_01.py

import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt

x1 = np.arange(-2,2,0.05)
x2 = np.arange(-2,2,0.05)

xx1_fine, xx2_fine = np.meshgrid(x1,x2)

a = 0; b = -1; c = 0;

yy_fine = a*xx1_fine**2 + 2*b*xx1_fine*xx2_fine + c*xx2_fine**2

# 3D visualization

fig, ax = plt.subplots()
ax = plt.axes(projection='3d')

ax.plot_wireframe(xx1_fine,xx2_fine,yy_fine,
                  color = [0.8,0.8,0.8],
                  linewidth = 0.25)

ax.contour3D(xx1_fine,xx2_fine,yy_fine,15,
             cmap = 'RdYlBu_r')

ax.view_init(elev=30, azim=60)
ax.xaxis.set_ticks([])
ax.yaxis.set_ticks([])
ax.zaxis.set_ticks([])
plt.tight_layout()
ax.set_proj_type('ortho')
plt.show()
```

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

```
# 2D visualization
fig, ax = plt.subplots()
ax.contourf(xx1_fine, xx2_fine, yy_fine, 15,
            cmap = 'RdYlBu_r')

ax.xaxis.set_ticks([])
ax.yaxis.set_ticks([])
ax.set_aspect('equal')

plt.show()
```

12.3 几何角度：开合

本节，我们从一个有趣的几何视角来分析一种特殊矩阵的 Cholesky 分解。

以 2×2 矩阵为例

给定如 2×2 矩阵 P ，它的主对角元素为 1，非主对角线元素为余弦值 $\cos\theta_{1,2}$ ：

$$P = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 \end{bmatrix} \quad (11)$$

对矩阵 P 进行 Cholesky 分解可以得到：

$$P = LL^T = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cos\theta_{1,2} & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ 0 & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix}}_{L^T} = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

矩阵 P 的 Cholesky 分解还可以写成：

$$P = R^T R = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cos\theta_{1,2} & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix}}_{R^T} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ 0 & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix}}_R \quad (13)$$

将 R 写成：

$$R = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ 0 & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix} = [\mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}_2] \quad (14)$$

在平面直角坐标系中， \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 分别代表水平和竖直正方向的单位向量。 R 分别乘 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 ，得到 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 ：

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= R\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ 0 & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \mathbf{r}_2 &= R\mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{1,2} \\ 0 & \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta_{1,2} \\ \sin\theta_{1,2} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (15)$$

很容易判断 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 均为单位向量。

而向量 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 夹角余弦值为：

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_1\| \|\mathbf{r}_2\|} = \cos \theta_{1,2} \quad (16)$$

几何视角

如图 1 所示，从几何角度来讲， $\mathbf{R} (\mathbf{L}^T)$ 的相当于把原本正交的 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 标准正交基转化成具有一定夹角的 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]$ 非正交基，且 $\mathbf{e}_1 = \mathbf{r}_1$ ，相当于“锚定”。这类似 QR 分解中， \mathbf{q}_1 平行于 \mathbf{x}_1 。再次强调，虽然 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]$ 中每个向量为单位向量，但是 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2]$ 为非正交基。

图 1 所示这种几何变换像是“门合页”的开合。

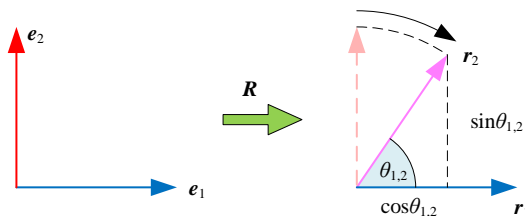


图 1. 开合

$0 < \cos \theta_{1,2} < 1$ 时，即 $0^\circ < \theta_{1,2} < 90^\circ$ ，“合页”从直角 90° 关闭角度至 $\theta_{1,2}$ 。

$-1 < \cos \theta_{1,2} < 0$ 时，即 $90^\circ < \theta_{1,2} < 180^\circ$ ，“合页”从直角 90° 打开至 $\theta_{1,2}$ 。我们给这种几何变换取个名字，叫做“开合”。注意，这种所谓“开合”的几何变换只适用于标准正交基。

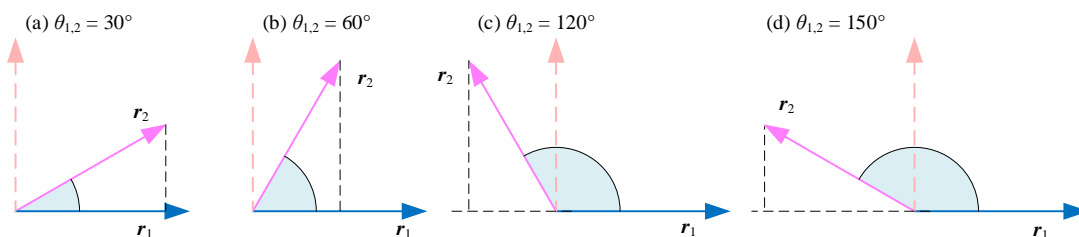


图 2. 不同的开合角度 $\cos \theta_{1,2}$

计算 (14) 中 \mathbf{R} 的行列式值：

$$|\mathbf{R}| = \begin{vmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} \\ 0 & \sin \theta_{1,2} \end{vmatrix} = \sin \theta_{1,2} \quad (17)$$

这个行列式值结果表明“开合”前后，图形的面积缩比为 $\sin\theta_{1,2}$ 。这和我们在图 3 中看到一致。 $[e_1, e_2]$ 构造正方形面积为 1，而 $[r_1, r_2]$ 构造的平行四边形面积为 $\sin\theta_{1,2}$ 。

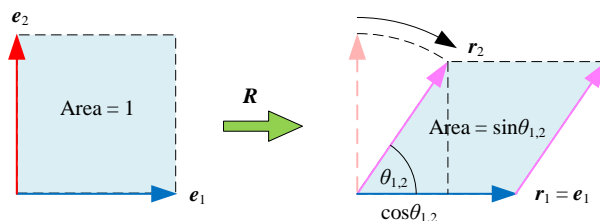


图 3. 开合对应的面积变化

举个例子

给定 P 为：

$$P = \begin{bmatrix} 1 & \cos 60^\circ \\ \cos 60^\circ & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0.5 & 1 \end{bmatrix} \quad (18)$$

对 P 进行 Cholesky 分解得到：

$$P = LL^T = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.5 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{R^T} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_R \quad (19)$$

图 4 所示为 e_1 和 e_2 经过 (19) 中 R 转换得到向量 r_1 和 r_2 。

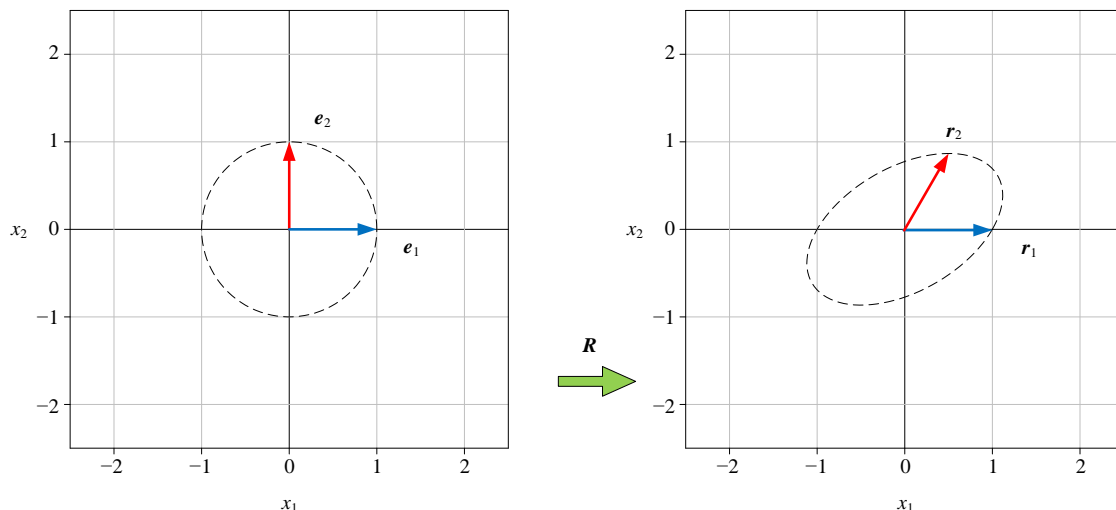


图 4. e_1 和 e_2 经过 R 转换得到向量 r_1 和 r_2

12.4 几何变换：缩放 → 开合

给定 Σ 具体形式如下：

$$\Sigma = \begin{bmatrix} a^2 & a \cdot b \cdot \cos \theta_{1,2} \\ a \cdot b \cdot \cos \theta_{1,2} & b^2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

其中， a 和 b 都是正数。

先把 Σ 写成：

$$\Sigma = \underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}}_S \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} \\ \cos \theta_{1,2} & 1 \end{bmatrix}}_P \underbrace{\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}}_S \quad (21)$$

将 (11) 代入 (21)，得到：

$$\Sigma = (RS)^T (RS) = \underbrace{\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}}_S \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cos \theta_{1,2} & \sin \theta_{1,2} \end{bmatrix}}_{R^T} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} \\ 0 & \sin \theta_{1,2} \end{bmatrix}}_R \underbrace{\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}}_S \quad (22)$$

上式相当于对 Σ 直接进行 Cholesky 分解的结果：

$$\Sigma = L_\Sigma (L_\Sigma)^T \quad (23)$$

将 RS 先后作用在 e_1 和 e_2 上，得到 x_1 和 x_2 ：

$$\begin{aligned} x_1 &= RS e_1 = \begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} \\ 0 & \sin \theta_{1,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ x_2 &= RS e_2 = \begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} \\ 0 & \sin \theta_{1,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} \cos \theta_{1,2} \\ \sin \theta_{1,2} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (24)$$

这相当于，先对 e_1 和 e_2 先缩放 (S)，再开合 (R)。请读者格外注意几何变换的先后顺序，这个顺序就是矩阵乘法的从右向左的顺序。

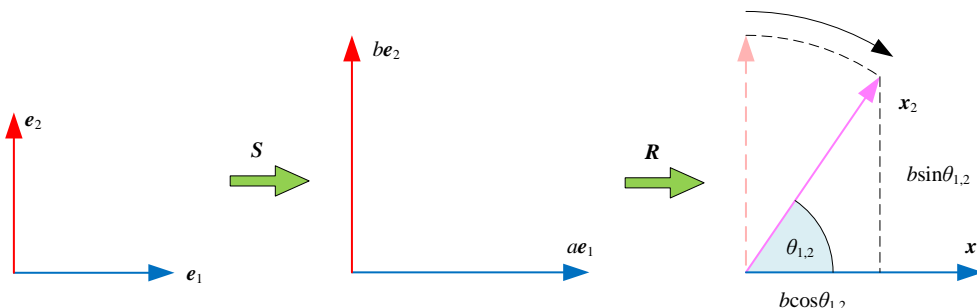


图 5. 先缩放再开合

计算 (24) 中，向量 x_1 和 x_2 夹角余弦值为：

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\| \|\mathbf{x}_2\|} = \frac{a \cdot b \cdot \cos \theta_{1,2}}{a \cdot b} = \cos \theta_{1,2} \quad (25)$$

发现向量 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_2 夹角等同于向量 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 夹角。

举个例子

给定 Σ 具体值为,

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1.5^2 & 1.5 \times 2 \times \cos 60^\circ \\ 1.5 \times 2 \times \cos 60^\circ & 2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.25 & 1.5 \\ 1.5 & 4 \end{bmatrix} \quad (26)$$

对 Σ 进行 Cholesky 分解得到:

$$\Sigma = (\mathbf{R}_\Sigma)^\top (\mathbf{R}_\Sigma) = \begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 1 & 1.732 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.5 & 1 \\ 0 & 1.732 \end{bmatrix} \quad (27)$$

图 6 所示为 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 经过 \mathbf{R}_Σ 转换得到向量 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_2 :

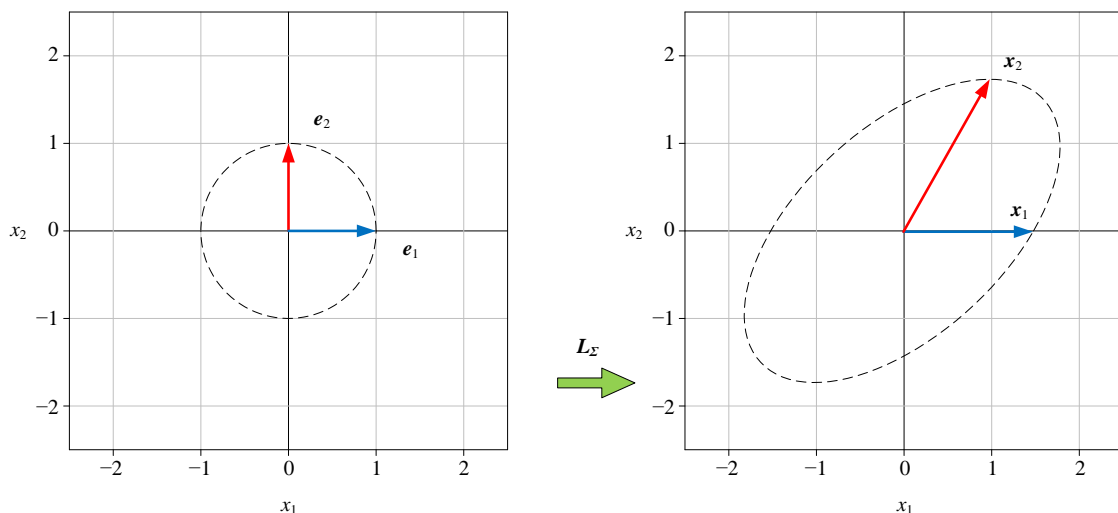


图 6. \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 经过 \mathbf{R}_Σ 转换得到向量 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_2

按照 (22), Σ 可以分解成:

$$\Sigma = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_S \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0.5 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{R^\top} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_R \underbrace{\begin{bmatrix} 1.5 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}}_S \quad (28)$$

图 7 所示为 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 分别经过 S 和 R 转换, 得到向量 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_2 。

本系列丛书一般用 Σ 来代表协方差矩阵。本节之所以用矩阵 Σ ，这是因为大家很快会发现 Cholesky 分解和协方差矩阵之间的关系。而本章前文中提到的矩阵 P ，就是本书之后要讲的相关性系数矩阵。类比的话，矩阵 P 中的余弦值就是相关性系数。

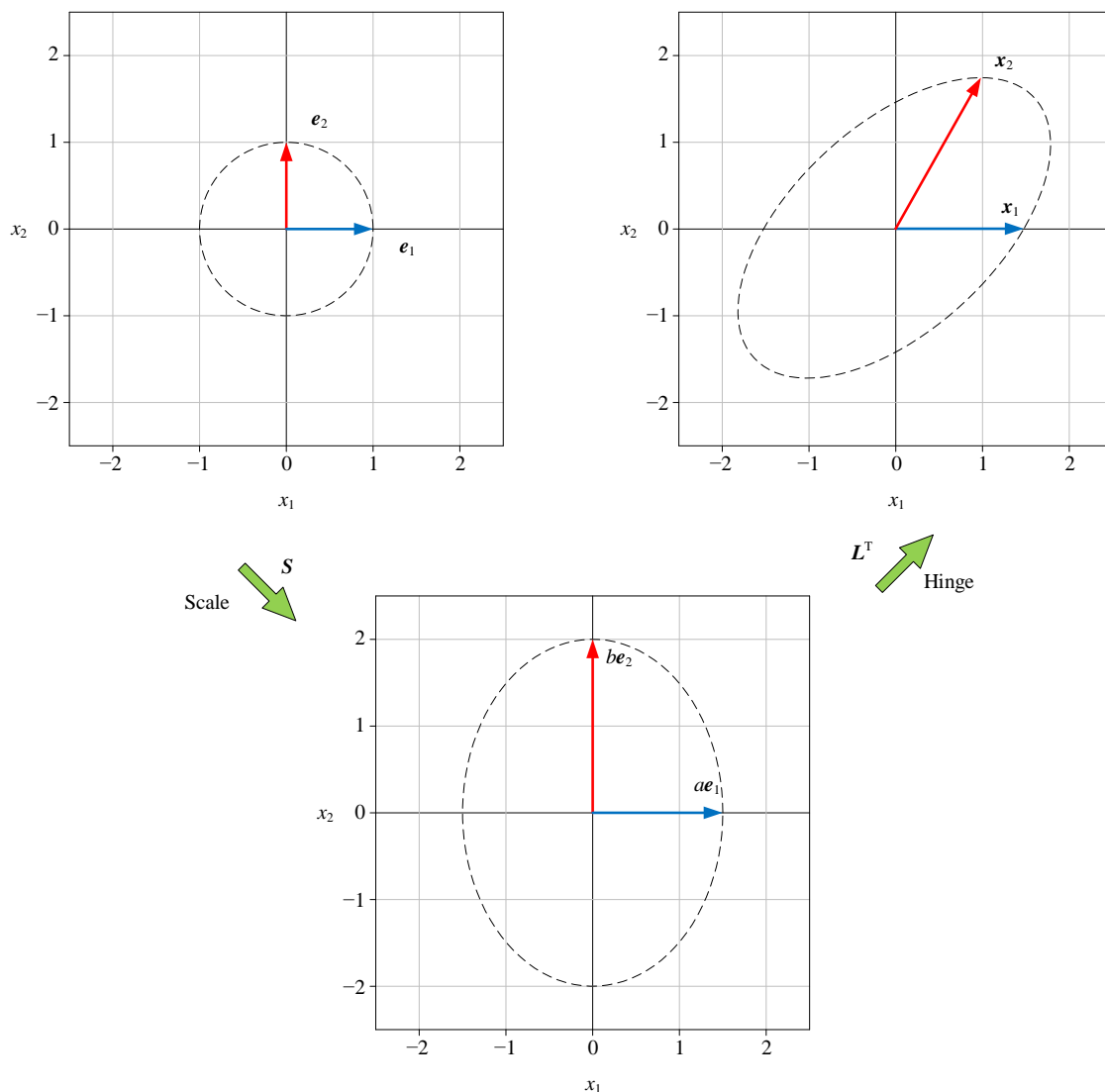


图 7. e_1 和 e_2 分别经过 S 和 R 转换

12.5 推广到三维空间

本节利用立体几何视角探讨 Cholesky 分解。

给定如下 3×3 矩阵 P ,

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} & \cos \theta_{1,3} \\ \cos \theta_{1,2} & 1 & \cos \theta_{2,3} \\ \cos \theta_{1,3} & \cos \theta_{2,3} & 1 \end{bmatrix} \quad (29)$$

其中, $\theta_{1,2}$ 、 $\theta_{1,3}$ 、 $\theta_{2,3}$ 三个角度均大于等于 0° 。

对 \mathbf{P} 进行 Cholesky 分解:

$$\mathbf{P} = \mathbf{R}^T \mathbf{R} \quad (30)$$

其中,

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} & \cos \theta_{1,3} \\ 0 & \sqrt{1 - \cos^2 \theta_{1,2}} & \frac{\cos \theta_{2,3} - \cos \theta_{1,3} \cos \theta_{1,2}}{\sqrt{1 - \cos^2 \theta_{1,2}}} \\ 0 & 0 & \sqrt{1 - \cos^2 \theta_{1,3} - \frac{(\cos \theta_{2,3} - \cos \theta_{1,3} \cos \theta_{1,2})^2}{1 - \cos^2 \theta_{1,2}}} \end{bmatrix} \quad (31)$$

相当于:

$$\mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{bmatrix} \cos \theta_{1,2} \\ \sqrt{1 - \cos^2 \theta_{1,2}} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_3 = \begin{bmatrix} \cos \theta_{1,3} \\ \frac{\cos \theta_{2,3} - \cos \theta_{1,3} \cos \theta_{1,2}}{\sqrt{1 - \cos^2 \theta_{1,2}}} \\ \sqrt{1 - \cos^2 \theta_{1,3} - \frac{(\cos \theta_{2,3} - \cos \theta_{1,3} \cos \theta_{1,2})^2}{1 - \cos^2 \theta_{1,2}}} \end{bmatrix} \quad (32)$$

将 $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3]$ 代入 (30) 得到:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & \cos \theta_{1,2} & \cos \theta_{1,3} \\ \cos \theta_{1,2} & 1 & \cos \theta_{2,3} \\ \cos \theta_{1,3} & \cos \theta_{2,3} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1^T \\ \mathbf{r}_2^T \\ \mathbf{r}_3^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1^T \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_1^T \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_1^T \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_2^T \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2^T \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_2^T \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_3^T \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_3^T \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_3^T \mathbf{r}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_3 \cdot \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_3 \cdot \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_3 \cdot \mathbf{r}_3 \end{bmatrix} \quad (33)$$

观察 (33) 对角线, 可以容易判断 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 均为单位向量, 但是 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3]$ 并非正交基。

而 \mathbf{P} 中非对角线元素 $\cos \theta_{i,j}$ 就是 \mathbf{r}_i 和 \mathbf{r}_j 向量夹角的余弦值。下面验证一下。

计算向量 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 角度的余弦值:

$$\frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{\|\mathbf{r}_1\| \|\mathbf{r}_2\|} = \cos \theta_{1,2} \quad (34)$$

计算向量 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_3 角度的余弦值:

$$\frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_3}{\|\mathbf{r}_1\| \|\mathbf{r}_3\|} = \cos \theta_{1,3} \quad (35)$$

计算向量 \mathbf{r}_2 和 \mathbf{r}_3 角度的余弦值：

$$\frac{\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{r}_3}{\|\mathbf{r}_2\| \|\mathbf{r}_3\|} = \cos \theta_{2,3} \quad (36)$$

几何视角

如图 8 所示，利用 \mathbf{R} ，我们完成了标准正交基 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ 向非正交基 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3]$ 的转换。

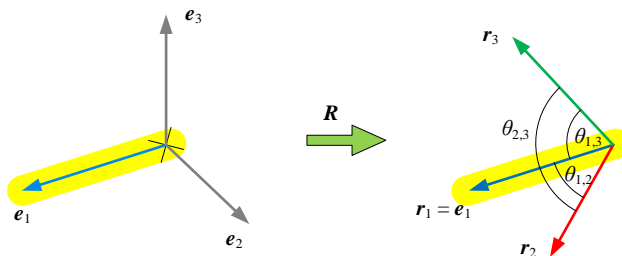


图 8. 三维系转化成满足指定两两夹角的坐标系

换个角度，(29) 中矩阵 \mathbf{P} 指定了目标向量两两夹角 $\cos \theta_{1,2}$ 、 $\cos \theta_{1,3}$ 、 $\cos \theta_{2,3}$ 。即 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 的夹角为 $\cos \theta_{1,2}$ ， \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_3 的夹角为 $\cos \theta_{1,3}$ ， \mathbf{r}_2 和 \mathbf{r}_3 的夹角为 $\cos \theta_{2,3}$ 。我们想要找到空间中满足这个条件的三个单位向量。

对 \mathbf{P} 进行 Cholesky 分解得到矩阵 \mathbf{R} ，它的列向量 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 就是我们想要找的三个向量的空间坐标点。特别地， \mathbf{r}_1 和 \mathbf{e}_1 相同。好就好比，在构造 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3]$ 这个非正交基时， \mathbf{r}_1 锚定在 \mathbf{e}_1 。

两个例子

图 9 给出两个例子，在给定 $\cos \theta_{1,2}$ 、 $\cos \theta_{1,3}$ 、 $\cos \theta_{2,3}$ 三个角度条件下，我们可以利用 Cholesky 分解矩阵 \mathbf{P} 计算得到满足夹角条件的三个单位向量 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 。

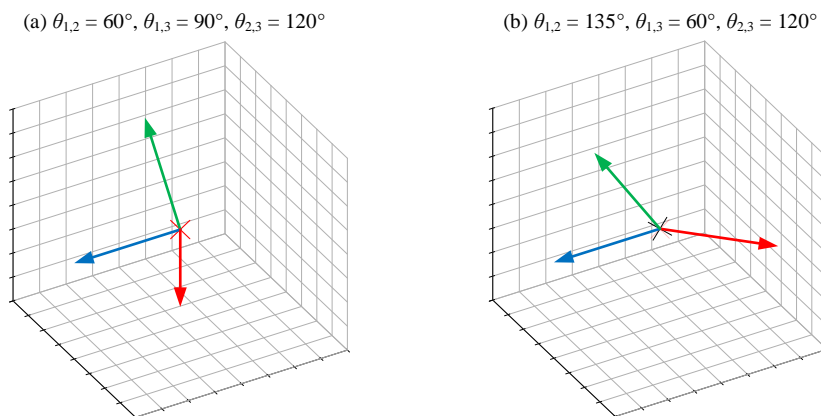


图 9. 给定三个夹角，确定向量三维空间位置

条件

在图 8 中，任意两个夹角必须大于等于第三个夹角，也就是必须满足如下三个不等式：

$$\begin{aligned}\theta_{1,2} + \theta_{1,3} &\geq \theta_{2,3} \\ \theta_{1,2} + \theta_{2,3} &\geq \theta_{1,3} \\ \theta_{1,3} + \theta_{2,3} &\geq \theta_{1,2}\end{aligned}\quad (37)$$

另外，三个角度夹角必须小于等于 360° ：

$$\theta_{1,2} + \theta_{1,3} + \theta_{2,3} \leq 360^\circ \quad (38)$$

试想一个有趣的现象，在图 8 中，如果 $\cos\theta_{1,2} = \cos\theta_{1,3} + \cos\theta_{2,3}$ ，这意味着 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 三个向量在一个平面上，也就是 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 线性相关。

这种情况，矩阵 \mathbf{R} 不满秩，也就是说 \mathbf{P} 也不满秩。正定矩阵满秩，也就是说这种情形 \mathbf{P} 不可以 Cholesky 分解。

而三个夹角之和等于 360° 时，即 $\cos\theta_{1,2} + \cos\theta_{1,3} + \cos\theta_{2,3} = 360^\circ$ ， \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 三个向量也在一个平面上， \mathbf{P} 也不可以 Cholesky 分解。

最后，如果 $\theta_{1,2}$ 、 $\theta_{1,3}$ 、 $\theta_{2,3}$ 任一角度为 0° ，这意味着存在两个向量共线，这种情况 \mathbf{P} 也不可以 Cholesky 分解。

也就是为了保证 \mathbf{P} 可以 Cholesky 分解，即正定，需要满足以下条件：

$$\begin{aligned}\theta_{1,2} &> 0^\circ, \quad \theta_{1,3} > 0^\circ, \quad \theta_{2,3} > 0^\circ \\ \theta_{1,2} + \theta_{1,3} &> \theta_{2,3}, \quad \theta_{1,2} + \theta_{2,3} > \theta_{1,3}, \quad \theta_{1,3} + \theta_{2,3} > \theta_{1,2} \\ \theta_{1,2} + \theta_{1,3} + \theta_{2,3} &< 360^\circ\end{aligned}\quad (39)$$

夹角相同

再看一组特殊情况，向量两两夹角相同，即，

$$\theta_{1,2} = \theta_{1,3} = \theta_{2,3} \quad (40)$$

打个比方，这个例子像是一把雨伞的开合。假设雨伞只有三个伞骨，雨伞开合时，伞骨之间的两两夹角相等。

雨伞合起来时，三个伞骨并拢，相当于三个向量之间夹角为 0° ，即共线。

如果雨伞最大开度可以让伞面为平面，这时三个伞骨之间夹角为 120° ，也就是三个向量在一个平面上。

有了这两个极限情况，我们知道向量之间夹角取值范围为 $[0^\circ, 120^\circ]$ 。

图 10 给出四个不同开合角度。实际上，图 10 (d) 对应的矩阵 \mathbf{P} 是不能进行 Cholesky 分解，这是因为 $\theta_{1,2}$ 、 $\theta_{1,3}$ 、 $\theta_{2,3}$ 三个角度都是 120° ，因此 \mathbf{r}_1 、 \mathbf{r}_2 、 \mathbf{r}_3 在一个平面上，线性相关。

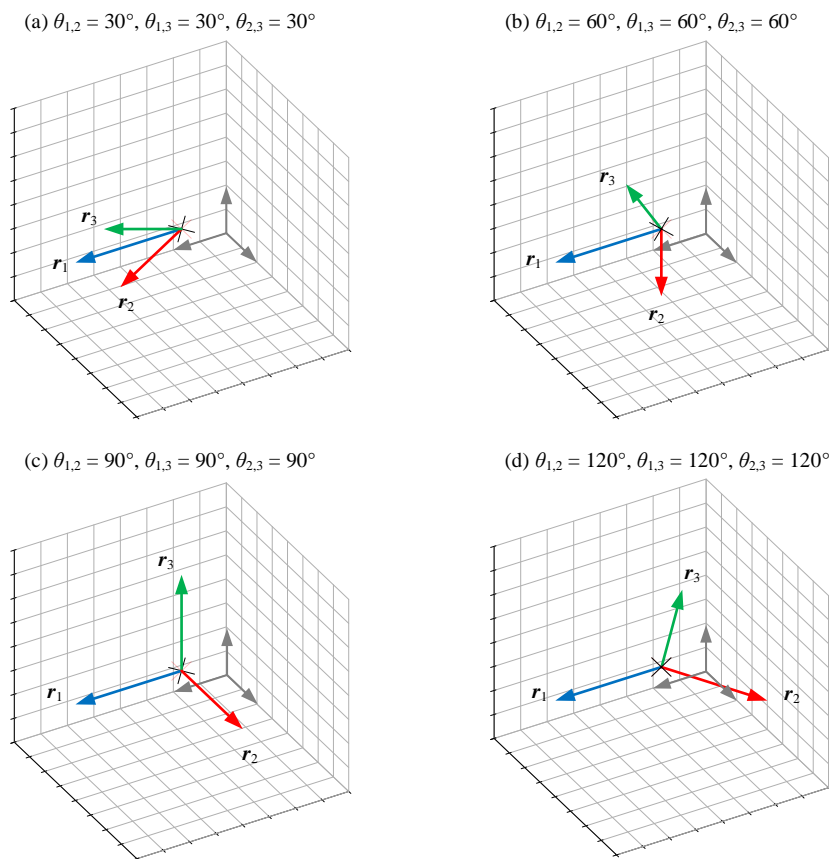


图 10. 相等角度条件下，确定向量三维空间位置

至此，我们利用空间几何视角，探讨了 Cholesky 分解以及满足 Cholesky 分解条件。



Bk4_Ch12_02.py 绘制图 9 和图 10。请读者自行设定夹角条件，看看哪些角度组合能够进行 Cholesky 分解，哪些不能。

```
# Bk4_Ch12_02.py

import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import numpy as np
import math as m

cos_theta_12 = np.cos(m.radians(135))
cos_theta_13 = np.cos(m.radians(60))
cos_theta_23 = np.cos(m.radians(120))

P = np.array([[1, cos_theta_12, cos_theta_13],
              [cos_theta_12, 1, cos_theta_23],
              [cos_theta_13, cos_theta_23, 1]])

L = np.linalg.cholesky(P)
R = L.T

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(projection='3d')

plt.plot(0,0,0,color = 'r', marker = 'x',
         markersize = 12)

colors = ['b', 'r', 'g']
for i in np.arange(0,3):

    vector = R[:,i]
    v = np.array([vector[0],vector[1],vector[2]])
    vlength=np.linalg.norm(v)
    ax.quiver(0,0,0,vector[0],vector[1],vector[2],
             length=vlength, color = colors[i])

ax.set_xlim([-1,1])
ax.set_ylim([-1,1])
ax.set_zlim([-1,1])

ax.set_xlabel('x')
ax.set_ylabel('y')
ax.set_zlabel('z')

ax.xaxis.set_ticklabels([])
ax.yaxis.set_ticklabels([])
ax.zaxis.set_ticklabels([])
ax.view_init(35, 60)
ax.set_proj_type('ortho')
ax.set_box_aspect([1,1,1])
```

12.6 从格拉姆矩阵到相似度矩阵

有了本章前文内容铺垫，下面我们回头来看一下本书前文介绍的一个重要的概念——格拉姆矩阵。

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

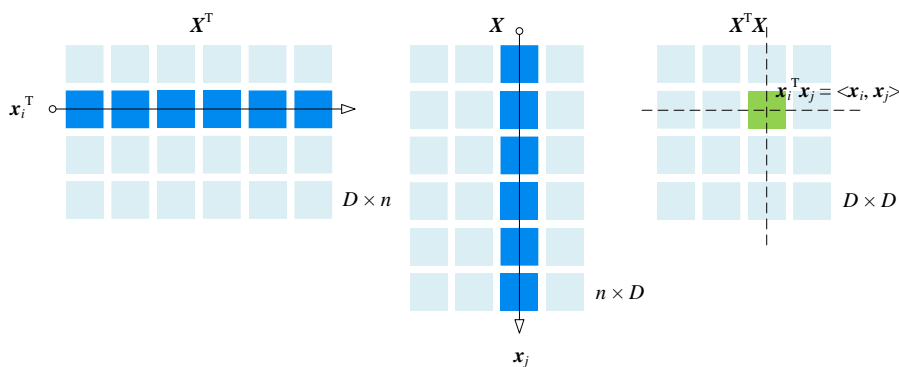


图 11. 格拉姆矩阵

如图 11 所示，数据矩阵 X 的格拉姆矩阵 G 可以写成标量积形式：

$$G = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_D \\ \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 \rangle & \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_D \rangle \\ \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 \rangle & \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{x}_D, \mathbf{x}_1 \rangle & \langle \mathbf{x}_D, \mathbf{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{x}_D, \mathbf{x}_D \rangle \end{bmatrix} \quad (41)$$

确定列向量坐标

对 G 进行 Cholesky 分解得到：

$$G = R_G^T R_G \quad (42)$$

将 R_G 写成列向量：

$$R_G = [\mathbf{r}_{G,1} \quad \mathbf{r}_{G,2} \quad \cdots \quad \mathbf{r}_{G,D}] \quad (43)$$

将 (43) 代入 (42) 得到：

$$G = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{G,1}^T \\ \mathbf{r}_{G,2}^T \\ \vdots \\ \mathbf{r}_{G,D}^T \end{bmatrix} [\mathbf{r}_{G,1} \quad \mathbf{r}_{G,2} \quad \cdots \quad \mathbf{r}_{G,D}] = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{r}_{G,1}, \mathbf{r}_{G,1} \rangle & \langle \mathbf{r}_{G,1}, \mathbf{r}_{G,2} \rangle & \cdots & \langle \mathbf{r}_{G,1}, \mathbf{r}_{G,D} \rangle \\ \langle \mathbf{r}_{G,2}, \mathbf{r}_{G,1} \rangle & \langle \mathbf{r}_{G,2}, \mathbf{r}_{G,2} \rangle & \cdots & \langle \mathbf{r}_{G,2}, \mathbf{r}_{G,D} \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{r}_{G,D}, \mathbf{r}_{G,1} \rangle & \langle \mathbf{r}_{G,D}, \mathbf{r}_{G,2} \rangle & \cdots & \langle \mathbf{r}_{G,D}, \mathbf{r}_{G,D} \rangle \end{bmatrix} \quad (44)$$

(41) 等价于 (44)，向量模和向量夹角之间完全等价。这相当于我们在 \mathbb{R}^D 中找到了 X 每个列向量的具体坐标！

以鸢尾花数据矩阵 X 为例， X 可以写成四个列向量左右排列，即 $X = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4]$ 。这些列向量都有 150 个元素，显然不能直接在 \mathbb{R}^4 空间中展示。

图 12 所示为计算 X 的 Gram 矩阵 G 过程热图。如前文所述，矩阵 G 中包含了 $[x_1, x_2, x_3, x_4]$ 各个列向量的模，以及它们之间两两夹角。一个向量就两个元素——大小和方向， G 这相当于集成了 $[x_1, x_2, x_3, x_4]$ 每个向量关键信息。

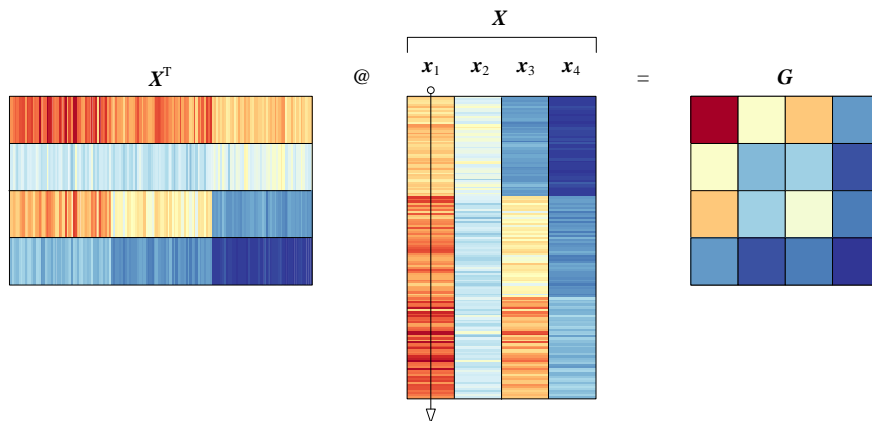


图 12. 鸢尾花数据格拉姆矩阵

如图 13 所示，对 Gram 矩阵 G 进行 Cholesky 分解得到上三角矩阵 R_G ， R_G 的列向量长度为 4，它们在 \mathbb{R}^4 空间中，等价于 $[x_1, x_2, x_3, x_4]$ 。

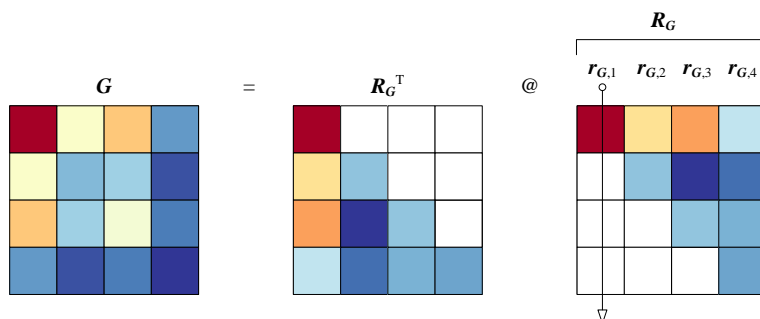


图 13. 对格拉姆矩阵 G 进行 Cholesky 分解

向量夹角

以向量夹角余弦形式展开 G 中向量积：

$$G = \begin{bmatrix} \|x_1\| \|x_1\| \cos \theta_{1,1} & \|x_1\| \|x_2\| \cos \theta_{2,1} & \cdots & \|x_1\| \|x_D\| \cos \theta_{1,D} \\ \|x_2\| \|x_1\| \cos \theta_{1,2} & \|x_2\| \|x_2\| \cos \theta_{2,2} & \cdots & \|x_2\| \|x_D\| \cos \theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \|x_D\| \|x_1\| \cos \theta_{1,D} & \|x_D\| \|x_2\| \cos \theta_{2,D} & \cdots & \|x_D\| \|x_D\| \cos \theta_{D,D} \end{bmatrix} \quad (45)$$

观察矩阵 G ，它包含了数据矩阵 X 中列向量的两个重要信息——模 $\|\mathbf{x}_i\|$ 、方向（向量两两夹角 $\cos\theta_{ij}$ ）。

定义缩放矩阵 S ，具体形式如下：

$$S = \begin{bmatrix} \|\mathbf{x}_1\| & & & \\ & \|\mathbf{x}_2\| & & \\ & & \ddots & \\ & & & \|\mathbf{x}_D\| \end{bmatrix} \quad (46)$$

对 G 左右乘上 S 矩阵的逆，得到矩阵 C ：

$$C = S^{-1}GS^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1}{\|\mathbf{x}_1\|\|\mathbf{x}_1\|} & \frac{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_1\|\|\mathbf{x}_2\|} & \cdots & \frac{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_D}{\|\mathbf{x}_1\|\|\mathbf{x}_D\|} \\ \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_1}{\|\mathbf{x}_2\|\|\mathbf{x}_1\|} & \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_2\|\|\mathbf{x}_2\|} & \cdots & \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_D}{\|\mathbf{x}_2\|\|\mathbf{x}_D\|} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_1}{\|\mathbf{x}_D\|\|\mathbf{x}_1\|} & \frac{\mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_2}{\|\mathbf{x}_D\|\|\mathbf{x}_2\|} & \cdots & \frac{\mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_D}{\|\mathbf{x}_D\|\|\mathbf{x}_D\|} \end{bmatrix} \quad (47)$$

余弦相似度矩阵

矩阵 C 有自己的名字——余弦相似度矩阵 (cosine similarity matrix)。这是因为 C 的每个元素实际上计算的是 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j 向量的夹角 θ_{ij} 余弦值 $\cos\theta_{ij}$ ，即，

$$C = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{2,1} & \cdots & \cos\theta_{1,D} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 & \cdots & \cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\theta_{1,D} & \cos\theta_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (48)$$

相比格拉姆矩阵 G ，余弦相似度矩阵 C 中只包含了 X 列向量两两夹角 $\cos\theta_{ij}$ 这个单一信息。

对 C 进行 Cholesky 分解得到：

$$C = LL^T = R^T R \quad (49)$$

将 R 写成 $[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_D]$ ， C 可以写成：

$$C = R^T R = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1^T \\ \mathbf{r}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{r}_D^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 & \cdots & \mathbf{r}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1^T \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_1^T \mathbf{r}_2 & \cdots & \mathbf{r}_1^T \mathbf{r}_D \\ \mathbf{r}_2^T \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2^T \mathbf{r}_2 & \cdots & \mathbf{r}_2^T \mathbf{r}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{r}_D^T \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_D^T \mathbf{r}_2 & \cdots & \mathbf{r}_D^T \mathbf{r}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cos\theta_{2,1} & \cdots & \cos\theta_{1,D} \\ \cos\theta_{1,2} & 1 & \cdots & \cos\theta_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cos\theta_{1,D} & \cos\theta_{2,D} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (50)$$

根据本章前文分析，我们知道 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_D$ 都是单位向量。 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_D$ 两两夹角余弦值满足相似度矩阵 C 的要求。

这一重要性质在蒙特卡洛模拟 (Monte Carlo simulation) 中有重要应用。如图 14, 本章介绍的内容可以用来产生满足指定相关性系数要求的随机数。

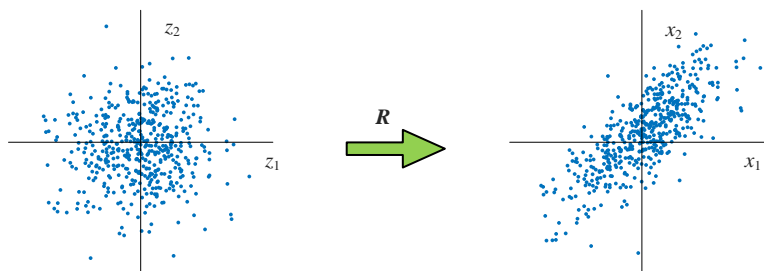
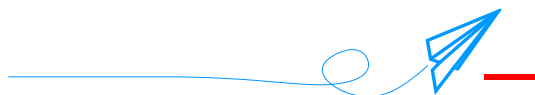


图 14. 产生满足指定相关性矩阵要求的随机数



本章从几何视角讲解了 Cholesky 分解。只有正定矩阵才可以进行 Cholesky 分解, 这一点可以用来判断矩阵是否为正定。我们创造了“开合”这个词用来描述 Cholesky 分解得到的上三角矩阵对应的几何变换。

对 Gram 矩阵进行 Cholesky 分解可以帮我们确定原数据矩阵的列向量空间坐标。此外, 我们将在后续协方差矩阵和蒙特卡罗模拟中再聊到 Cholesky 分解。

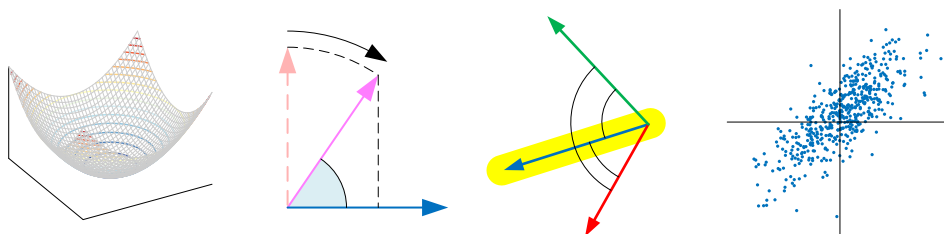


图 15. 总结本章重要内容的四副图