### Singular Value Decomposition

# 15 奇异值分解

最重要的矩阵分解,没有之一



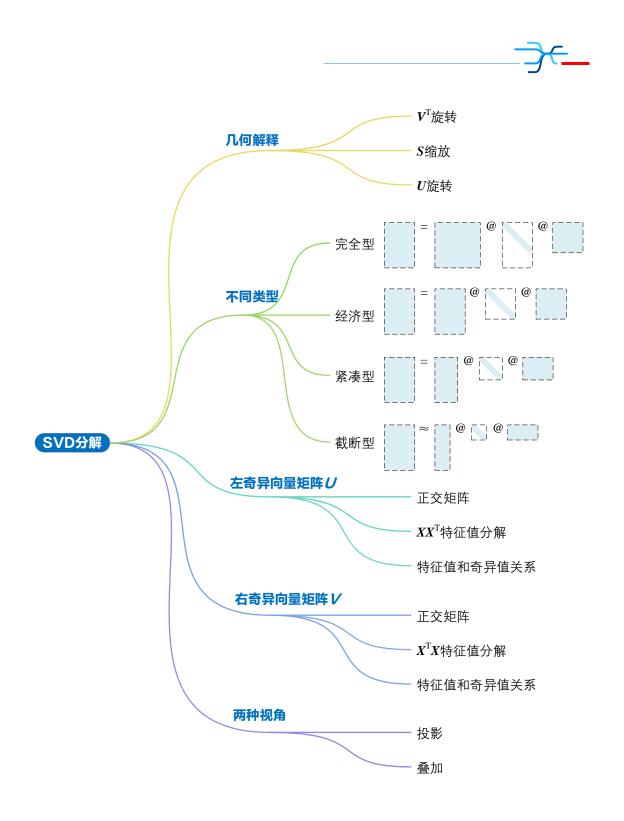
就我而言, 我一无所知, 但满眼的繁星让我入梦。

For my part I know nothing with any certainty, but the sight of the stars makes me dream.

—— 文森特·梵高 (Vincent van Gogh) | 荷兰后印象派画家 | 1853 ~ 1890



- matplotlib.pyplot.quiver() 绘制箭头图
- numpy.linspace() 在指定的间隔内,返回固定步长的数据
- numpy.linalg.svd() 进行SVD分解
- numpy.diag() 以一维数组的形式返回方阵的对角线元素,或将一维数组转换成对角阵



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

# 

本书第 11 章简要介绍过**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD) —— 宇宙中最重要的矩阵分解。本节将从几何视角解剖奇异值分解。

对数据矩阵  $X_{n \times D}$  奇异值分解得到:

$$X_{_{mD}} = USV^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

其中, S 为对角阵, 其主对角线元素  $s_i$  (i = 1, 2, ..., D) 为**奇异值** (singular value)。

 $ilde{f \Lambda}$  注意, SVD 分解得到的奇异值非负, 即  $s_i \ge 0$ 。此外注意, (1) 中矩阵  ${f V}$  的转置运算。

U的列向量称作左奇异向量 (left singular vector)。

V的列向量称作右奇异向量 (right singular vector)。

SVD 分解有四种主要形式,完全型是其中一种。在完全型 SVD 分解中,U 和 V 为正交矩阵,即 U 和自己转置  $U^{\mathrm{T}}$  的乘积为单位矩阵;V 和自己转置  $V^{\mathrm{T}}$  的乘积也是单位矩阵。

从向量空间角度来看, $U = [u_1, u_2, ..., u_n]$  为 $\mathbb{R}^n$  的规范正交基, $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$  为 $\mathbb{R}^D$  的规范正交基。

根据这三个矩阵的形态,我们知道,从几何视角来看,正交矩阵 U 和 V 矩阵作用是旋转,而对角矩阵 S 的作用是缩放。

大家可能会问这和特征值分解对应的"旋转 $\rightarrow$ 缩放 $\rightarrow$ 旋转"有何不同?

特征值分解中,三步几何变换是旋转  $(V^{-1}) \rightarrow$  缩放  $(\Lambda) \rightarrow$  旋转 (V)。

奇异值分解中,三步几何变换是旋转  $(V^T)$  → 缩放 (S) →旋转 (U)。一个明显的区别是, $V^T$  的 旋转发生在  $\mathbb{R}^D$  空间,U 的旋转则发生在  $\mathbb{R}^T$  空间。值得强调的是,这要求奇异分解为"完全型"。本书后续会介绍包括"完全型"在内的四种 SVD 分解。

#### 几何视角

为了方便解释, 我们用 2×2矩阵 A 做例子。

利用矩阵 A 完成  $z \to x$  线性映射,即 x = Az。利用 SVD 分解,将  $A = USV^T$  代入映射运算得到:

$$Az = U S V^{T} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$
 (2)

图 1 所示为几何变换角度解释奇异值分解,A 乘 x,相当于先用  $V^{T}$  旋转,再用 S 缩放,最后用 U 旋转。

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

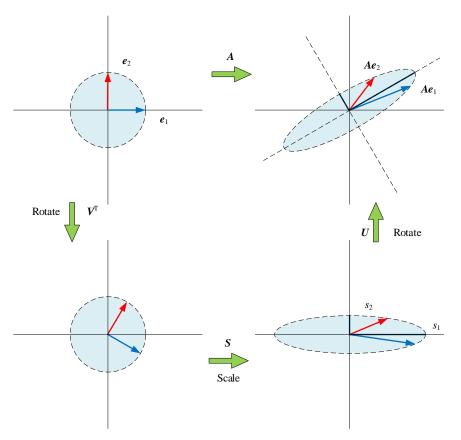


图 1. 几何角度解释奇异值分解

#### 举个实例

下面用具体实例解释图1。给定如下2×2矩阵A:

$$A = \begin{bmatrix} 1.625 & 0.6495 \\ 0.6495 & 0.875 \end{bmatrix} \tag{3}$$

对矩阵 A 进行 SVD 分解:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^{\mathsf{T}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}}_{\mathbf{S}} \underbrace{\begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}}_{\mathbf{V}^{\mathsf{T}}}$$
(4)

即,

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} 0.866 & 0.5 \\ -0.5 & 0.866 \end{bmatrix}$$
 (5)

▲ 注意,如果特征值分解和奇异值分解的对象都是可对角化矩阵,两个分解得到的结果等价。但是,奇异值分解的强大之处在于,任何实数矩阵都可以奇异值分解。

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

给定  $e_1$  和  $e_2$  两个单位向量:

$$\boldsymbol{e}_{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_{2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{6}$$

 $e_1$ 和  $e_2$ 经过 A 转换分别得到:

$$\mathbf{A}\mathbf{e}_{1} = \begin{bmatrix} 1.625 & 0.6495 \\ 0.6495 & 0.875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.625 \\ 0.6495 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}\mathbf{e}_{2} = \begin{bmatrix} 1.625 & 0.6495 \\ 0.6495 & 0.875 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6495 \\ 0.875 \end{bmatrix}$$
(7)

图 2 所示为转换前后的结果对比。请大家注意转换前后向量的方向和长度(模)的变化。

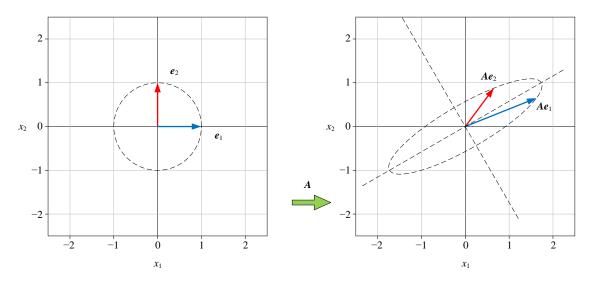


图 2.  $e_1$ 和  $e_2$ 经过 A 线性转换

#### 分步几何变换

- (7) 等价于"旋转  $(V^T) \rightarrow 缩放 (S) \rightarrow 旋转 (U)$ ",具体如图 3 所示。
- $e_1$ 和  $e_2$ 两个向量先通过  $V^T$ 进行旋转,得到:

$$\mathbf{V}^{\mathsf{T}} \mathbf{e}_{1} = \begin{bmatrix} 0.866 & 0.5 \\ -0.5 & 0.866 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.866 \\ -0.5 \end{bmatrix} \\
\mathbf{V}^{\mathsf{T}} \mathbf{e}_{2} = \begin{bmatrix} 0.866 & 0.5 \\ -0.5 & 0.866 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.866 \end{bmatrix}$$
(8)

在 (8) 基础上,再用对角矩阵 S 进行缩放,得到:

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

$$\mathbf{S}\mathbf{V}^{\mathsf{T}}\mathbf{e}_{1} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.866 \\ -0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.732 \\ -0.25 \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{S}\mathbf{V}^{\mathsf{T}}\mathbf{e}_{2} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.866 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.433 \end{bmatrix}$$
(9)

在之前"旋转 ( $V^{T}$ )"和"缩放 (S)"两步基础上,最后再利用 U 进行旋转,得到:

$$USV^{\mathrm{T}} \boldsymbol{e}_{1} = \begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.732 \\ -0.25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.625 \\ 0.6495 \end{bmatrix}$$

$$USV^{\mathrm{T}} \boldsymbol{e}_{2} = \begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0.433 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.6495 \\ 0.875 \end{bmatrix}$$
(10)

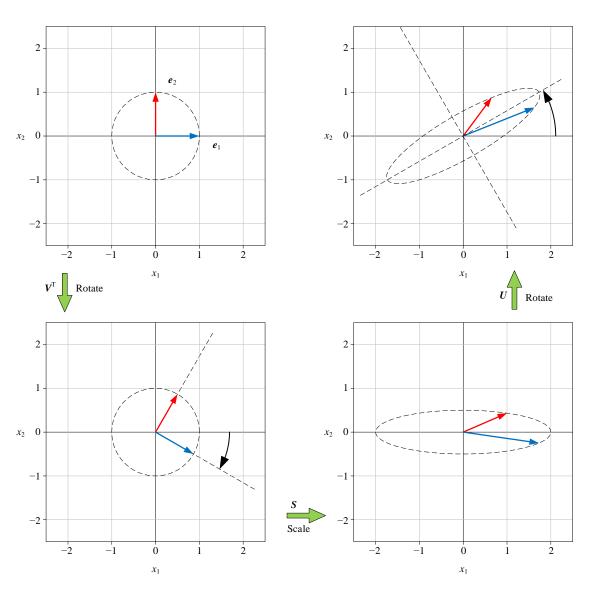


图 3.  $e_1$ 和  $e_2$ 分别经过  $V^T$ 、S和 U 转换

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

本书配套徽课视频均发布在 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



Bk4 Ch15 01.py 绘制图3所有子图。

# 15.2 **不同类型 SVD 分解**

SVD 分解分为完全型 (full)、经济型 (economy-size, thin)、紧凑型 (compact) 和截断型 (truncated) 四大类。

本节将简要介绍完全型和经济型两种奇异值分解之间的关系。下一章将深入讲解这四种 SVD 分解。

#### 完全型

图 4 所示为完全型 SVD 分解热图,其中左奇异值矩阵 U 为方阵,形状为  $n \times n$ 。S 的形状和 X 相同,为  $n \times D$ 。S 的主对角线元素  $S_i$  为奇异值,具体形式为:

$$S = \begin{bmatrix} s_1 & & & & \\ & s_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_D \end{bmatrix}$$

$$(11)$$

约定俗成,这D个奇异值的大小关系为 $s_1 \ge s_2 \ge ... \ge s_D$ 。

如图 4 所示,S 可以分块为上下两个子块——对角方阵、全 0 矩阵 O。

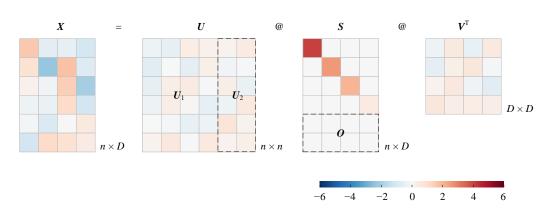


图 4. 矩阵 X 的完全型 SVD 分解

注意,一般情况,数据矩阵为"细高"长方形,偶尔大家也会见到"宽矮"长方形的数据矩阵。 (1) 中 X 为细高长方形,对 X 转置便得到宽矮长方形矩阵  $X^{T}$ 。如图 5 所示,相应的, $X^{T}$  的 SVD 分解为:

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V} \boldsymbol{S}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{12}$$

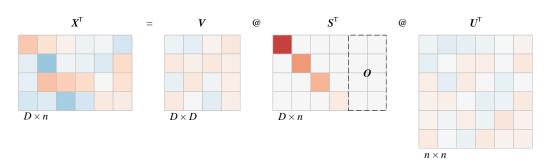


图 5. 矩阵  $X^T$  的完全型 SVD 分解

#### 经济型

图 6 所示为经济型 SVD 分解结果热图。可以发现,左奇异值矩阵 U 形状和 X 相同,均为为 n × D。而 S 为方阵,形状为 D × D。从图 4 到图 6,利用的是分块矩阵乘法,这个话题留到下一章讨论。

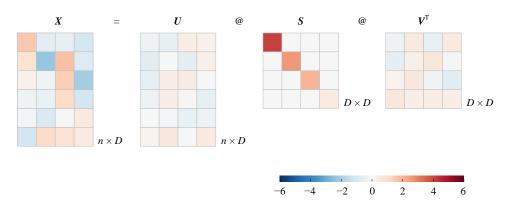


图 6. 经济型 SVD 分解

在经济型 SVD 分解中,S 为对角方阵:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D \end{bmatrix} \tag{13}$$

当S为对角方阵时, (12)可以写成:

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



Bk4\_Ch15\_02.py 中 Bk4\_Ch15\_02\_A 部分绘制图 4 和图 6。

# 15.3 **左奇异向量矩阵** *U*

U的列向量称作**左奇异向量** (left singular vector), U和自己转置  $U^{T}$ 的乘积为单位矩阵:

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I} \tag{15}$$

如图 7 所示,对于完全型 SVD 分解,U 为方阵。

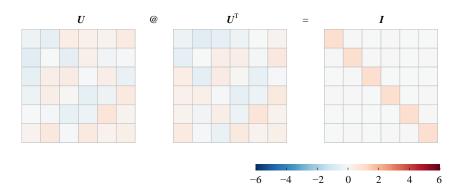
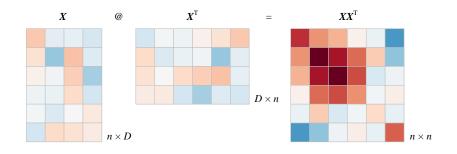


图 7. U 和自己转置  $U^{T}$  的乘积为单位矩阵

#### 特征值分解

本书前文提到过两次,细高的长方形矩阵 X 不能进行特征值分解。但是,它的格拉姆矩阵  $X^TX$  和  $XX^T$  都是对称矩阵,可以进行特征值分解。下面,我们先分析  $XX^T$ 。

图 8 所示为 X 和自己转置  $X^T$  相乘得到第一个格拉姆矩阵  $XX^T$  的热图, $XX^T$  为  $n \times n$  方阵。



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 8.X 和自己转置 $X^T$ 的乘积热图

对方阵  $XX^{T}$ 进行特征值分解,可以发现 U 的列向量是特征向量,而  $SS^{T}$  是  $XX^{T}$  的特征值矩阵:

$$XX^{\mathsf{T}} = (USV^{\mathsf{T}})(USV^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}}$$

$$= US(V^{\mathsf{T}}V)S^{\mathsf{T}}U^{\mathsf{T}}$$

$$= USS^{\mathsf{T}}U^{\mathsf{T}}$$
(16)

图 9 所示为 X<sup>T</sup>X 特征值分解热图。

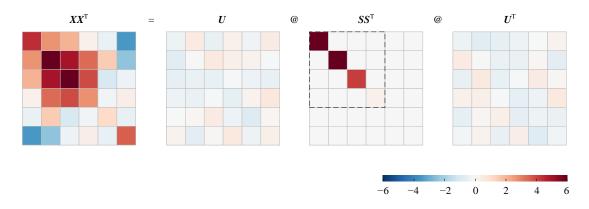


图 9. 对 XTX 特征值分解

 $SS^{T}$ 主对角线为特征值,对 $SS^{T}$ 展开得到:

$$SS^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} s_1 & & & & & \\ & s_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 & & & & \\ & s_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_D & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1^2 & & & & \\ & s_2^2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_D^2 & & \\ & & & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_D & & \\ & & & & \lambda_n \end{bmatrix}$$
(17)

观察上式,发现当 $j=1\sim D$ 时,特征值 $\lambda_j$ 和奇异值 $s_j$ 存在如下关系:

$$\lambda_i = s_i^2 \tag{18}$$

剩余的特征值均为0。

#### 向量空间

如图 10 所示, $XX^T$  进行特征值分解得到正交矩阵  $U = [u_1, u_2, ..., u_n]$  是个规范正交基,张起的空间为 $\mathbb{R}^n$ 。

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

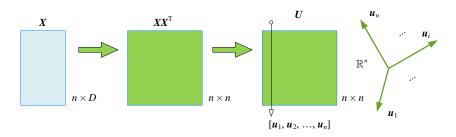


图 10. 对 Gram 矩阵  $XX^T$  特征值分解得到规范正交基 U

#### 类比 QR 分解

数据矩阵 X 进行 QR 分解得到:

$$X = QR \tag{19}$$

对于完全型 QR 分解,Q 为正交矩阵,也是一个规范正交基  $[q_1, q_2, ..., q_D]$ 。

对X进行完全型SVD分解, 把结果写成:

$$X = U(SV^{\mathsf{T}}) \tag{20}$$

对比 (19) 和 (20), $\boldsymbol{Q}$  和  $\boldsymbol{U}$  都是正交矩阵,形状虽然相同,但是两者显然是不同的规范正交基。

对于 QR 分解,  $x_1$  和  $q_1$  平行。打个比方,  $x_1$  像是一个锚, 确定了  $[q_1, q_2, ..., q_D]$  的空间位置。

而 SVD 分解则引入了一个优化视角——逐个最大化奇异值。本书第 18 章将深入介绍这个优化视角。

对比 (19) 和 (20), R 则对应  $SV^{T}$ 。特别地,  $SV^{T}$ 结果正交,即  $SV^{T}(SV^{T})^{T} = SV^{T}VS^{T} = SS^{T}$ 。



Bk4\_Ch15\_02.py 中 Bk4\_Ch15\_02\_B 部分绘制图 7。请读者自行编写代码绘制图 8 和图 9。

## 15.4 右奇异向量矩阵 V

V的列向量称作**右奇异向**量 (right singular vector), V和其转置 V 的乘积也是单位矩阵:

$$\boldsymbol{V}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I} \tag{21}$$

图 11 所示为上式运算对应热图。

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

值得强调的是,凡是满足  $V^TV = VV^T = I$  的方阵 V 都是**正交矩阵** (orthogonal matrix),对应规范正交基。但是,并不是所有正交矩阵都是**旋转矩阵** (rotation matrix)。只有  $\det(V) = 1$  的正交矩阵才叫旋转矩阵,这种矩阵也叫**特殊正交矩阵** (special orthogonal matrix)。

而一般正交矩阵的行列式值为 $\pm 1$ ,即  $\det(V) = \pm 1$ 。当  $\det(V) = -1$  时,V 对应的几何操作为"旋转 + 镜像"。这也告诉我们,SVD 分解中 V 和 U 并不唯一,V 和 U 的列向量都可以取负。当  $\det(V) = \det(U) = -1$  时,V 和 U 都是"旋转 + 镜像"。但是为了方便,完全型 SVD 结果中的 V 和 U,我们还是管它们的几何操作叫"旋转"。

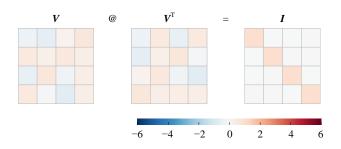


图 11.V 和其转置  $V^{T}$  的乘积也是单位矩阵

#### 特征值分解

图 12 所示为转置  $X^T$  和 X 相乘得到第二个格拉姆矩阵  $X^TX$  的热图, $X^TX$  为  $D \times D$  方阵。

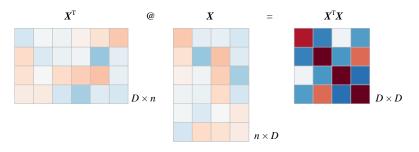


图 12. 转置  $X^T$  和 X 乘积热图

对 XTX 特征值分解得到:

$$X^{\mathsf{T}}X = (USV^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}}(USV^{\mathsf{T}})$$

$$= VS^{\mathsf{T}}(U^{\mathsf{T}}U)SV^{\mathsf{T}}$$

$$= VS^{\mathsf{T}}SV^{\mathsf{T}}$$
(22)

 $V \in X^TX$  的特征向量矩阵, $S^TS$  为特征值矩阵。图 13 所示为对  $X^TX$  进行特征值分解热图。

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

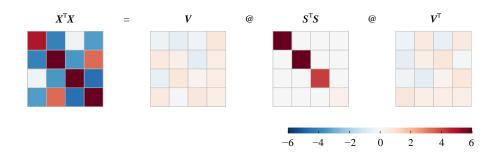


图 13. 对 XTX 进行特征值分解

如图 14 所示,对  $X^TX$  进行特征值分解, $S^TS$  为特征值矩阵,奇异值和特征值也存在如下平方关系:

$$\boldsymbol{S}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} s_1^2 & & & \\ & s_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_D^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}$$
(23)

比较 (17) 和 (23), 我们容易发现两个不同格拉姆矩阵特征值之间的关系。

本书第24章将总结分解对象不同时,奇异值和特征值之间的联系和差异。



图 14. 奇异值和特征值之间关系

#### 向量空间

如图 10 所示, $X^TX$  进行特征值分解得到正交矩阵  $V = [\nu_1, \nu_2, ..., \nu_D]$ ,它也是个规范正交基,张起的空间为 $\mathbb{R}^D$ 。

奇异值分解不但可以分解各种形状实数矩阵,并且一次性获得  $U = [u_1, u_2, ..., u_n]$  和  $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$  两个规范正交基。

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

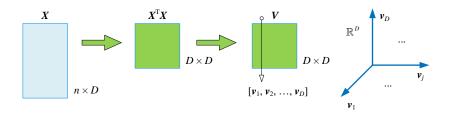


图 15. 对 Gram 矩阵  $X^TX$  特征值分解得到规范正交基 V



Bk4\_Ch15\_02.py 中 Bk4\_Ch15\_02\_C 部分绘制图 11。请读者自行编写代码绘制图 12 和图 13。

## 15.5 **两个视角:投影和数据叠加**

本节用两个视角观察 SVD 分解。这两个视角对应两种不同的矩阵乘法展开方式。

#### 投影

对于经济型 SVD 分解,将 (1) 等式左右两侧右乘 V,可以得到:

$$X_{n \times D}V = US \tag{24}$$

将V和U本身分别写成左右排列的列向量:

$$\boldsymbol{X}_{\scriptscriptstyle n\times D} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle 1} & \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle 2} & \cdots & \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_{\scriptscriptstyle 1} & \boldsymbol{u}_{\scriptscriptstyle 2} & \cdots & \boldsymbol{u}_{\scriptscriptstyle D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{s}_{\scriptscriptstyle 1} & & & & & \\ & \boldsymbol{s}_{\scriptscriptstyle 2} & & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & & \boldsymbol{s}_{\scriptscriptstyle D} \end{bmatrix}$$
(25)

(25) 进一步展开得到:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}\mathbf{v}_1 & \mathbf{X}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{X}\mathbf{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1\mathbf{u}_1 & s_2\mathbf{u}_2 & \cdots & s_D\mathbf{u}_D \end{bmatrix}$$
 (26)

因此,

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{v}_{j} = \boldsymbol{s}_{j}\boldsymbol{u}_{j} \tag{27}$$

上式可以理解为X向 $v_j$ 投影,结果为 $s_ju_j$ 。对应运算热图如图16所示。注意, $v_j$ 和 $u_j$ 都是单位向量,即两者的模都是1。从另外一个角度来看, $v_j$ 和 $u_j$ 都不含单位,而X和 $s_j$ 含有单位。

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

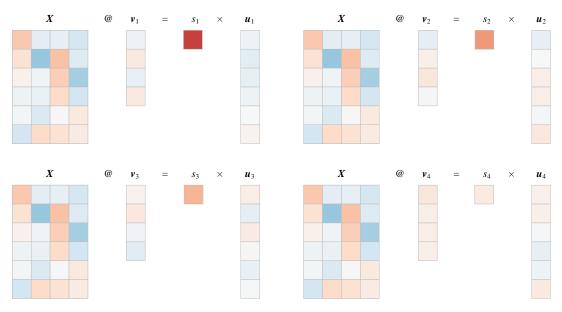


图 16. X 向  $v_j$  映射结果为  $s_j u_j$ 

(27) 左右都是向量,等式两侧分别求模,即  $L^2$  范数,得到:

$$\|Xv_j\| = \|s_ju_j\| = s_j\|u_j\| = s_j$$
 (28)

也就是说  $Xv_j$  的模为对应奇异值  $s_j$ 。由于奇异值  $s_1$  到  $s_4$ 从大到小排列,也就是说  $Xv_1$  的模最 大。这个角度对于理解主成分分析 (principal component analysis, PCA) 极为重要。

#### 叠加

第二种展开方式如下:

$$\boldsymbol{X}_{m \times D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_{1} & \boldsymbol{u}_{2} & \cdots & \boldsymbol{u}_{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{s}_{1} & & & \\ & \boldsymbol{s}_{2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \vdots & \\ & & \boldsymbol{v}_{D}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{s}_{1} \boldsymbol{u}_{1} & \boldsymbol{s}_{2} \boldsymbol{u}_{2} & \cdots & \boldsymbol{s}_{D} \boldsymbol{u}_{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_{2}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_{D}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \boldsymbol{s}_{1} \boldsymbol{u}_{1} \boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{s}_{2} \boldsymbol{u}_{2} \boldsymbol{v}_{2}^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{s}_{D} \boldsymbol{u}_{D} \boldsymbol{v}_{D}^{\mathrm{T}}$$

$$(29)$$

举个例子,对于D=4时:

$$X = s_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}} + s_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + s_3 u_2 v_3^{\mathrm{T}} + s_4 u_4 v_4^{\mathrm{T}}$$
(30)

(30) 中奇异值  $s_1$ 到  $s_4$ 从大到小排列,即  $s_1 \ge s_2 \ge s_3 \ge s_4$ 。

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

▲ 注意, s<sub>i</sub>u<sub>i</sub>v<sub>i</sub><sup>T</sup>的秩为 1。

如图 17 所示,可以发现对应 (30) 等式右侧从左到右的四项相当于逐步还原 X。特别地,请大家注意图 17 左侧四幅热图由上到下颜色逐渐变浅。下一章会深入介绍通过叠加换换原始数据矩阵。

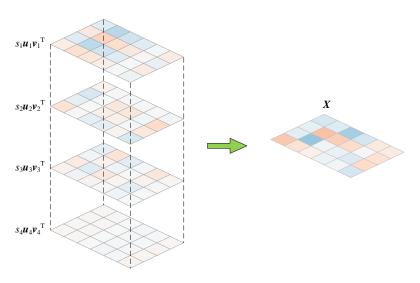


图 17. 四幅热图叠加还原原始图像

#### 张量积

再进一步, 利用 (27) 给出的关系, 我们将 (30) 写成张量积之和的形式:

$$X = s_{1} u_{1} v_{1}^{T} + s_{2} u_{2} v_{2}^{T} + s_{3} u_{3} v_{3}^{T} + s_{4} u_{4} v_{4}^{T}$$

$$= X v_{1} v_{1}^{T} + X v_{2} v_{2}^{T} + X v_{3} v_{3}^{T} + X v_{4} v_{4}^{T}$$

$$= X \left( v_{1} v_{1}^{T} + v_{2} v_{2}^{T} + v_{3} v_{3}^{T} + v_{4} v_{4}^{T} \right)$$

$$= X \left( v_{1} \otimes v_{1} + v_{2} \otimes v_{2} + v_{3} \otimes v_{3} + v_{4} \otimes v_{4} \right)$$
(31)

这就是本书第10章讲解的"二次投影"再"层层叠加"。

能完成类似 (31) 投影的规范正交基有无数组,为什么  $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$  脱颖而出?V的特殊性体现在哪?回答这个问题需要优化方面的知识,这是本书第 18 章要探讨的话题。



Bk4 Ch15 02.py 中 Bk4 Ch15 02 D 部分绘制本节图像。

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 18 四幅子图总结本章主要内容。请大家特别注意,奇异值分解对应"旋转  $\rightarrow$  缩放  $\rightarrow$  旋转",不同于特征值分解的"旋转  $\rightarrow$  缩放  $\rightarrow$  旋转"。

任何实数矩阵都可以进行奇异值分解,但是只有可对角矩阵才能进行特征值分解。此外,奇异值分解得到的两个正交矩阵 U 和 V 一般形状不同。

请大家注意,特征值和奇异值之间的关系。格拉姆矩阵是奇异值分解和特征值分解的桥梁, 这一点本书后续还要反复提到。

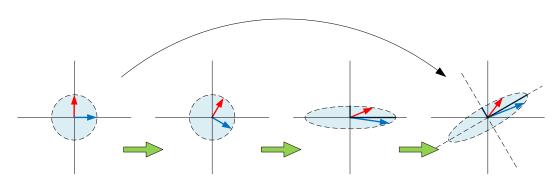


图 18. 总结本章重要内容的四幅图



数值线性代数是本书完全没有涉及的板块。

本书有关矩阵分解这个版块介绍了 LU 分解、Cholesky 分解、QR 分解、特征值分解、奇异值分解等等原理和应用,也介绍如何利用 Python 函数完成矩阵分解。但是本书没有提到计算机如何完成这些矩阵分解,也就是 Python 库中这些函数的底层算法实现,这就是数值线性代数研究的问题。

大家如果对这个话题感兴趣的话,可以参考 Holger Wendland 的 Numerical Linear Algebra: An Introduction。

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