Singular Value Decomposition

15 奇异值分解

最重要的矩阵分解,没有之一



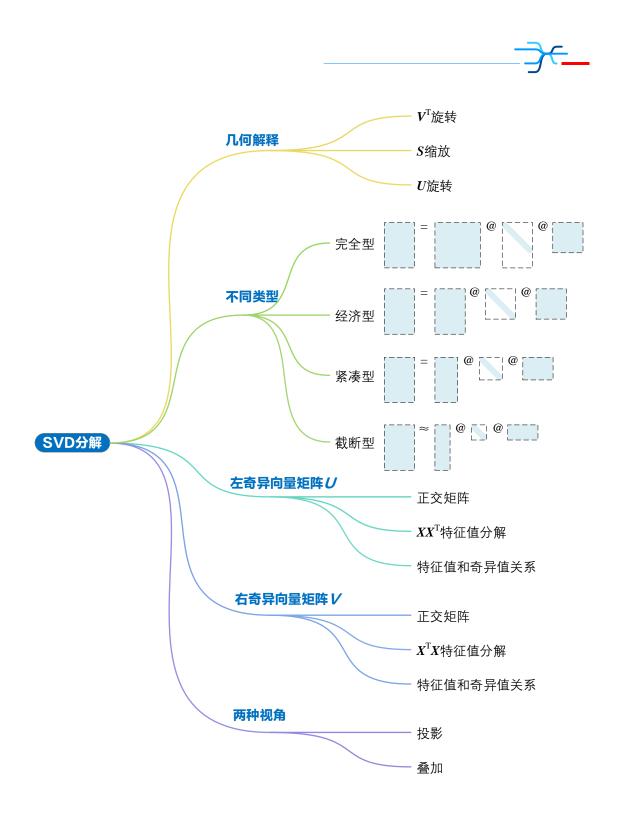
就我而言,我一无所知,但满眼的繁星让我入梦。

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 (j = 1, 2, ..., D) 为**奇异值** (singular value)。

▲ 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 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 (left 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^{T} 的乘积为单位矩阵;V 和自己转置 V^{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 $(V^T) \to$ 缩放 $(S) \to$ 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。

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:

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

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

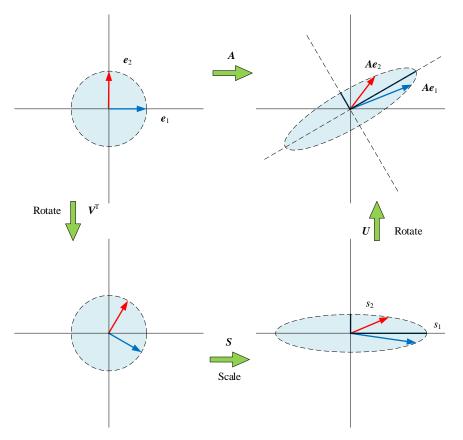


图 1. 几何角度解释奇异值分解

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:

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

即,

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

给定 e_1 和 e_2 两个单位向量:

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

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

 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。

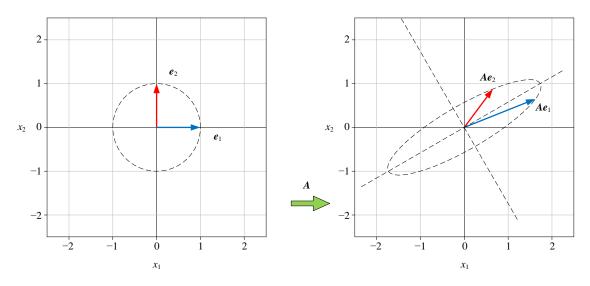


图 2. e_1 和 e_2 经过 A 线性转换

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:

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

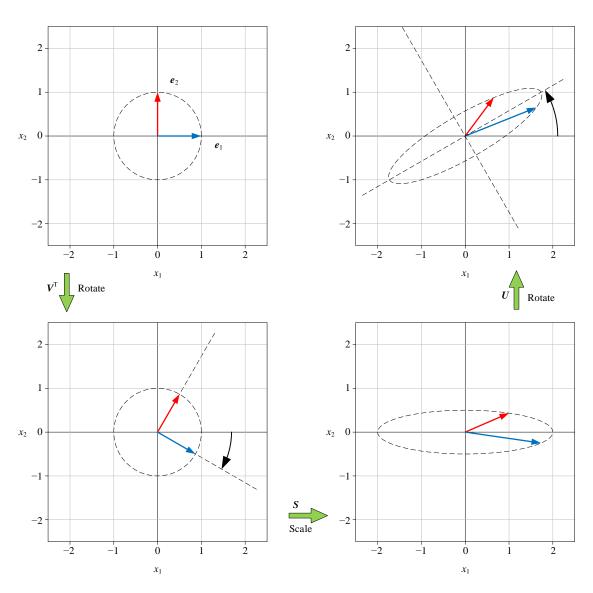


图 3. e_1 和 e_2 分别经过 V^T 、S和 U 转换

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。

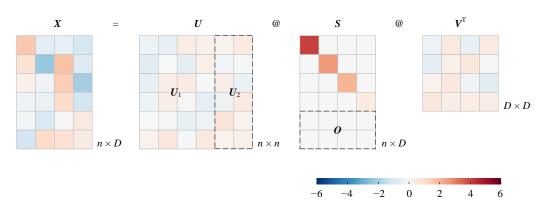


图 4. 矩阵 X 的完全型 SVD 分解

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

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:

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

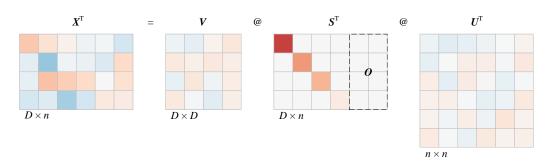


图 5. 矩阵 X^T 的完全型 SVD 分解

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。

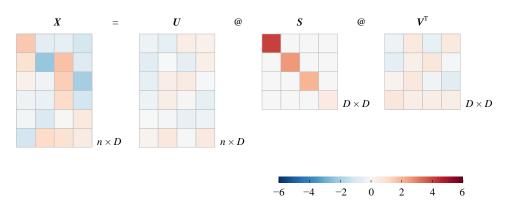


图 6. 经济型 SVD 分解

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

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{14}$$



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。

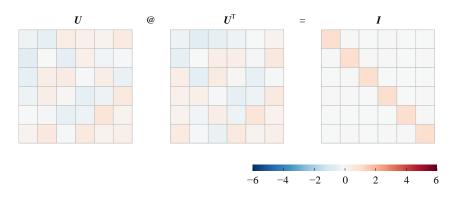
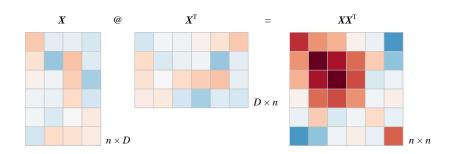


图 7. U 和自己转置 U^{T} 的乘积为单位矩阵

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:

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

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

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

图 9 所示为 XTX 特征值分解热图。

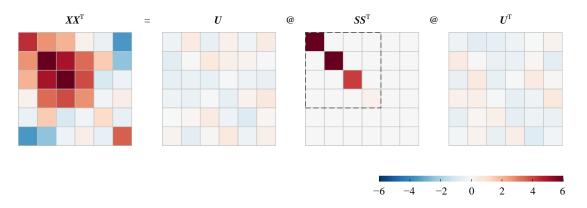


图 9. 对 XTX 特征值分解

 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 λ_j 和奇异值 s_j 存在如下关系:

$$\lambda_j = s_j^2 \tag{18}$$

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

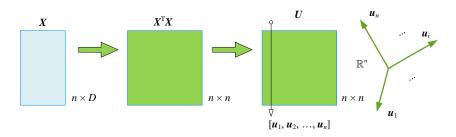


图 10. 对 Gram 矩阵 XX^T 特征值分解得到规范正交基 U

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), \mathbf{Q} 和 \mathbf{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^{T} 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

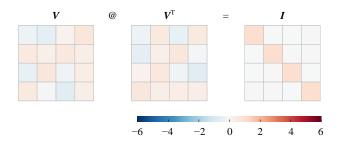


图 11.V 和其转置 V^{T} 的乘积也是单位矩阵

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。

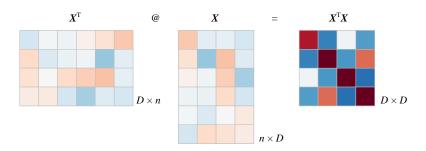


图 12. 转置 X^T 和 X 乘积热图

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。

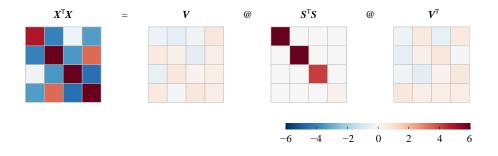


图 13. 对 XTX 进行特征值分解

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

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:

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

Error! Reference source not found. 和 (23) 奇异值和特征值之间的关系如图 14 所示。

◆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。

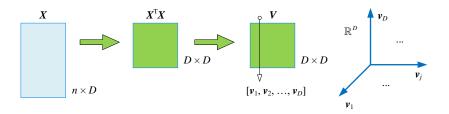


图 15. 对 Gram 矩阵 X^TX 特征值分解得到规范正交基 V



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。

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

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)

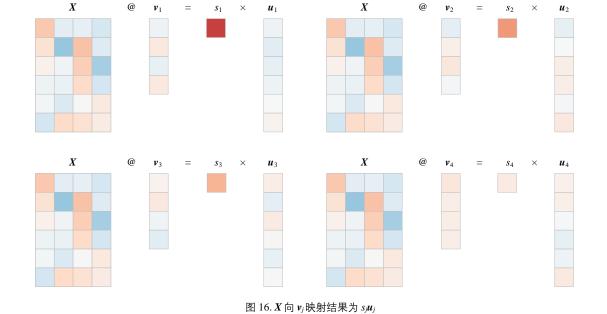
(25) 进一步展开得到:

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

因此,

$$X\mathbf{v}_{i} = s_{i}\mathbf{u}_{i} \tag{27}$$

上式可以理解为X向 v_i 投影,结果为 s_iu_i 。对应运算热图如图 16 所示。



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

(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_i 的模为对应奇异值 s_i 。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:

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

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

$$(29)$$

举个例子,对于D=4时:

$$X = s_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}} + s_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + s_3 u_3 v_3^{\mathrm{T}} + s_4 u_4 v_4^{\mathrm{T}}$$
(30)

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

▲ 注意, siuivi^T 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 左侧四副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。

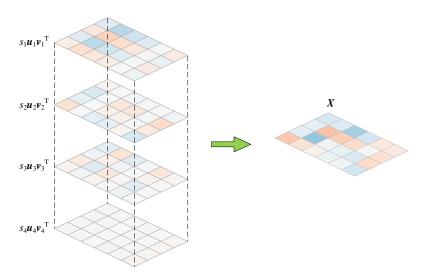


图 17. 四幅热图叠加还原原始图像

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:

$$X = s_{1} \boldsymbol{u}_{1} \boldsymbol{v}_{1}^{T} + s_{2} \boldsymbol{u}_{2} \boldsymbol{v}_{2}^{T} + s_{3} \boldsymbol{u}_{3} \boldsymbol{v}_{3}^{T} + s_{4} \boldsymbol{u}_{4} \boldsymbol{v}_{4}^{T}$$

$$= X \boldsymbol{v}_{1} \boldsymbol{v}_{1}^{T} + X \boldsymbol{v}_{2} \boldsymbol{v}_{2}^{T} + X \boldsymbol{v}_{3} \boldsymbol{v}_{3}^{T} + X \boldsymbol{v}_{4} \boldsymbol{v}_{4}^{T}$$

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

$$= X \left(\boldsymbol{v}_{1} \otimes \boldsymbol{v}_{1} + \boldsymbol{v}_{2} \otimes \boldsymbol{v}_{2} + \boldsymbol{v}_{3} \otimes \boldsymbol{v}_{3} + \boldsymbol{v}_{4} \otimes \boldsymbol{v}_{4} \right)$$

$$(31)$$

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。



图 18 四副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。

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

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。

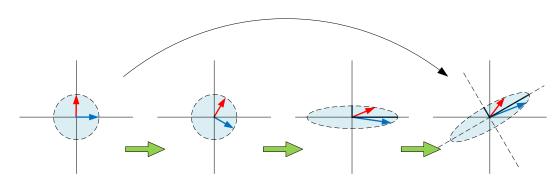


图 18. 总结本章重要内容的四副图



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。

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