

10

Data Projection

数据投影

以鸢尾花数据集为例



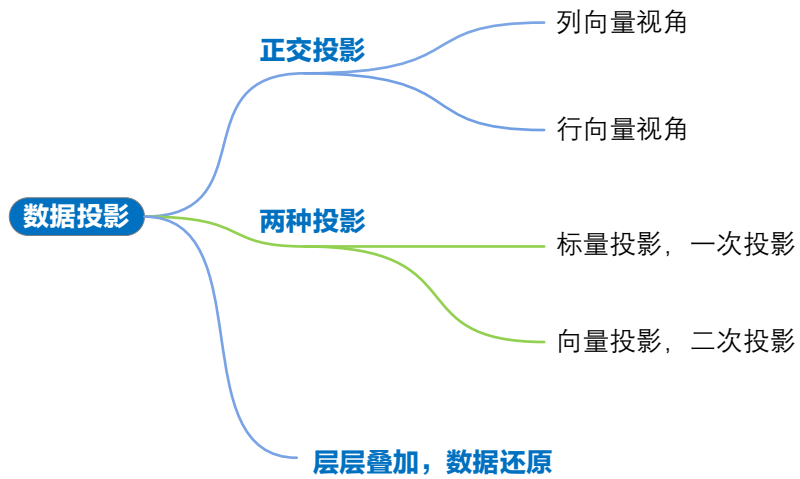
人生就像骑自行车。为了保持平衡，你必须不断移动。

Life is like riding a bicycle. To keep your balance, you must keep moving .

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



- ◀ `numpy.linalg.eig()` 特征值分解
- ◀ `seaborn.heatmap()` 绘制热图



10.1 从一个矩阵乘法运算说起

有数据的地方，就有向量！有向量的地方，就有几何！

本章承前启后，结合数据、几何、向量三个元素，总结本书前九章主要内容，并开启本书下一个重要板块——矩阵分解。

本节和下一节内容会稍微枯燥，请大家耐心读完。之后，本章会用鸢尾花数据集作为例子，给大家展开讲解这两节内容。

正交投影

本章从一个矩阵乘法运算说起：

$$\mathbf{Z} = \mathbf{XV} \quad (1)$$

\mathbf{X} 是数据矩阵，形状为 $n \times D$ ，即 n 行、 D 列。大家很清楚，以鸢尾花数据集为例， \mathbf{X} 每一行代表一个数据点，每一列代表一个特征。

\mathbf{V} 是正交矩阵，即满足 $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I}$ 。这意味着 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_D]$ 是 \mathbb{R}^D 空间的一组规范正交基。

几何视角下，矩阵乘积 \mathbf{XV} 完成的是 \mathbf{X} 向规范正交基 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_D]$ 投影，乘积 \mathbf{XV} 结果 \mathbf{Z} 代表 \mathbf{X} 在新的规范正交基下的坐标。

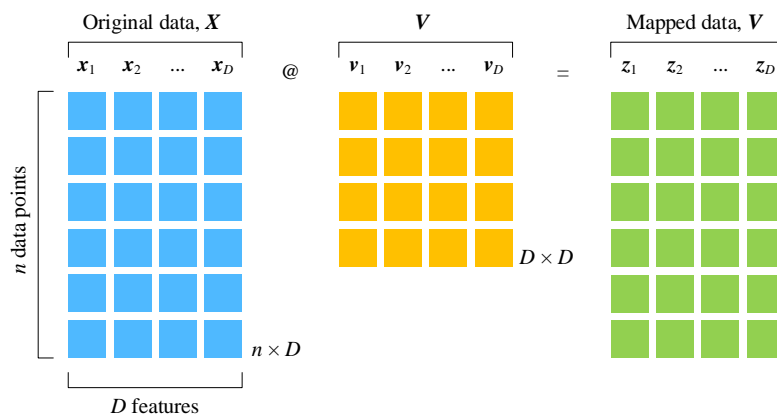


图 1. 数据矩阵 \mathbf{X} 到 \mathbf{Z} 线性变换

本书前文反复提到，一个矩阵可以看成由一系列行向量或列向量构造得到。下面，我们分别从这两个视角来分析 (1)。

列向量

将 \mathbf{Z} 和 \mathbf{V} 分别写成各自列向量, (1) 可以展开写成:

$$\begin{aligned} [\mathbf{z}_1 \quad \mathbf{z}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{z}_D] &= \mathbf{X} [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_D] \\ &= [\mathbf{X}\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{X}\mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{X}\mathbf{v}_D] \end{aligned} \quad (2)$$

(2) 这个视角是数据列向量 (即特征) 之间的转换。

提取 (2) 等式左右第 j 列, 得到 \mathbf{Z} 矩阵的第 j 列向量 \mathbf{z}_j 的计算式:

$$\mathbf{z}_j = \mathbf{X}\mathbf{v}_j \quad (3)$$

如图 2 所示, (3) 相当于 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D$ 通过线性组合得到 \mathbf{z}_j , 即:

$$\mathbf{z}_j = [\mathbf{x}_1 \quad \mathbf{x}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{x}_D] \begin{bmatrix} v_{1,j} \\ v_{2,j} \\ \vdots \\ v_{D,j} \end{bmatrix} = v_{1,j}\mathbf{x}_1 + v_{2,j}\mathbf{x}_2 + \cdots + v_{D,j}\mathbf{x}_D \quad (4)$$

\mathbf{v}_j

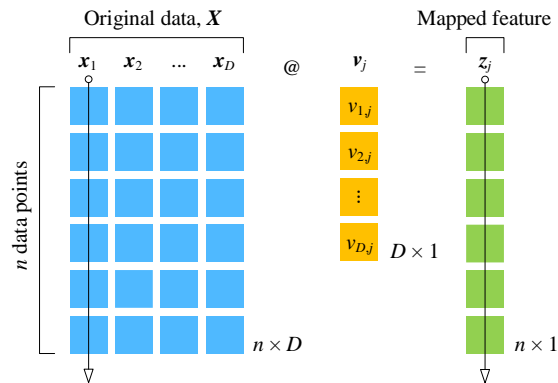


图 2. \mathbf{Z} 第 j 列向量 \mathbf{z}_j 的计算过程

行向量：点坐标

数据矩阵 \mathbf{X} 的任意行向量 $\mathbf{x}^{(i)}$ 代表一个样本点在 \mathbb{R}^D 的坐标。

⚠ 注意 \mathbb{R}^D 基底为标准正交基 $\mathbf{E} = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_D]$ 。

将 \mathbf{X} 和 \mathbf{Z} 写成行向量形式, (1) 可以写作:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{z}^{(1)} \\ \mathbf{z}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{z}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)}\mathbf{V} \\ \mathbf{x}^{(2)}\mathbf{V} \\ \vdots \\ \mathbf{x}^{(n)}\mathbf{V} \end{bmatrix} \quad (5)$$

如图 3 所示, (5) 代表每一行样本点之间的转换关系。即, (5) 的第 i 行 $\mathbf{x}^{(i)}$ 投影得到 \mathbf{Z} 的第 i 行向量 $\mathbf{z}^{(i)}$:

$$\mathbf{z}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i)}\mathbf{V} \quad (6)$$

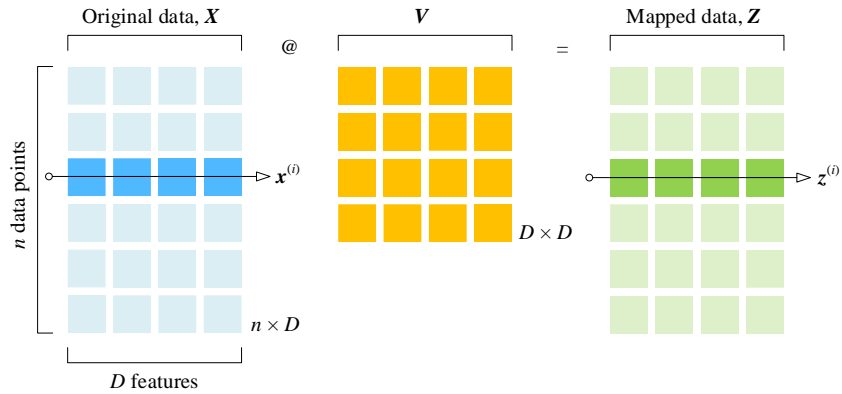


图 3. 每一行数据点之间的转换关系

进一步将 (6) 中 \mathbf{V} 写成 $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_D]$, (6) 可以展开得到:

$$\begin{bmatrix} z_{i,1} & z_{i,2} & \cdots & z_{i,D} \end{bmatrix} = \mathbf{x}^{(i)} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}^{(i)}\mathbf{v}_1 & \mathbf{x}^{(i)}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{x}^{(i)}\mathbf{v}_D \end{bmatrix} \quad (7)$$

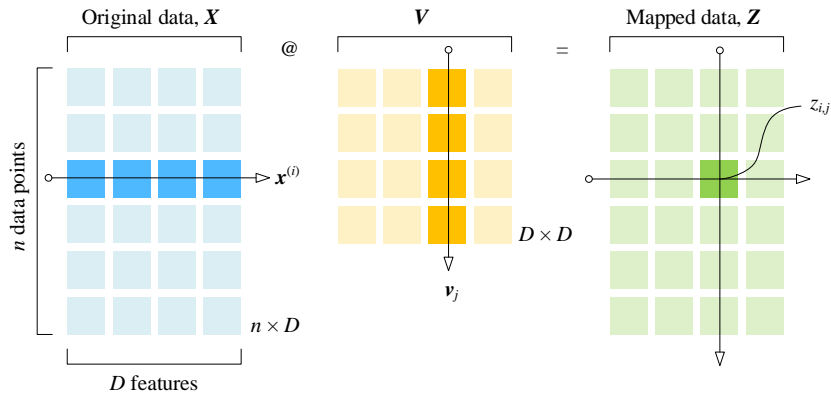


图 4. 每一行数据点向 \mathbf{v}_j 投影

取出 (7) 中向量 $\mathbf{z}^{(i)}$ 第 j 列元素 $z_{i,j}$ ，对应的运算为：

$$z_{i,j} = \mathbf{x}^{(i)} \mathbf{v}_j \quad (8)$$

图 4 对应 (8) 运算。

从空间视角来看，如图 5 所示， $\mathbf{x}^{(i)}$ 位于 \mathbb{R}^D 空间，而 $\mathbf{x}^{(i)}$ 正交投影到子空间 (subspace) $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 对应的坐标点就是 $z_{i,j}$ 。换句话说， $z_{i,j}$ 是 $\mathbf{x}^{(i)}$ 在 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 的像 (image)。 $\mathbf{x}^{(i)}$ 在 \mathbb{R}^D 空间是 D 维，在 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 仅是 1 维。图 5 中，从左边 \mathbb{R}^D 空间到右侧 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 这个投影过程，是个降维过程，数据发生压缩。

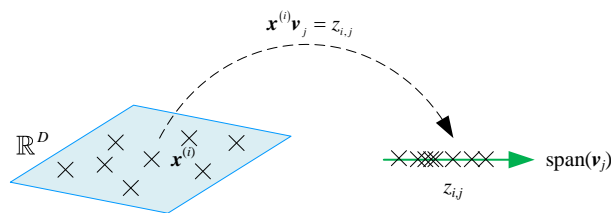


图 5. \mathbb{R}^D 空间数据点投影到 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$

10.2 二次投影 + 层层叠加

本书上一章给出下面这个看似莫明其妙的矩阵乘法：

$$\mathbf{X} = \mathbf{X} \mathbf{I} = \mathbf{X} \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{X} \quad (9)$$

数据矩阵 \mathbf{X} 乘以单位阵 \mathbf{I} ，结果为 \mathbf{X} 其本身！这个显而易见的等式，有何意义？

其实，这个看似再简单不过的矩阵运算背后实际藏着“二次投影”和“层层叠加”这两重几何操作！下面，我们就解密这两个几何操作。

将 \mathbf{V} 写成 $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_D]$ ，代入 (9) 得到：

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \mathbf{X} \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{X} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \mathbf{v}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_D^T \end{bmatrix} \\ &= \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T}_{\mathbf{X}_1} + \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2^T}_{\mathbf{X}_2} + \cdots + \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{v}_D \mathbf{v}_D^T}_{\mathbf{X}_D} \end{aligned} \quad (10)$$

令，

$$\mathbf{X}_j = \mathbf{X} \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^T \quad (11)$$

图 6 所示为上述运算， X_j 的形状和原数据矩阵 X 完全相同。我们称图 6 为二次投影，一会解释原因。

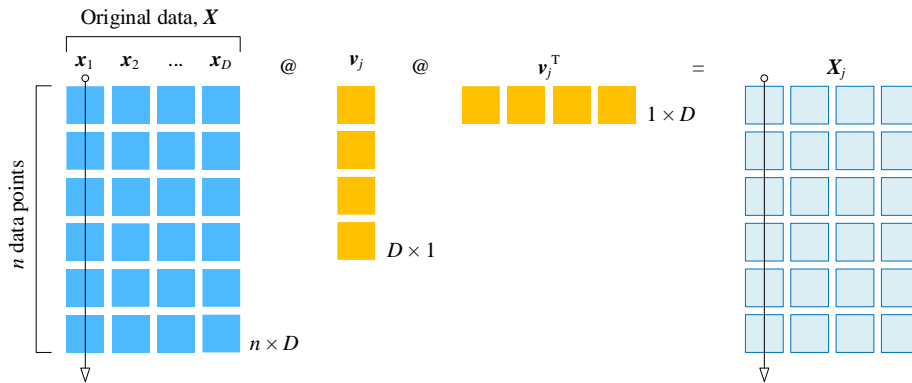


图 6. 二次投影

(10) 可以写成：

$$X = X_1 + X_2 + \dots + X_D \quad (12)$$

上式就是“层层叠加”。如图 7 所示， D 个形状完全相同的数据，层层叠加还原原始数据 X 。

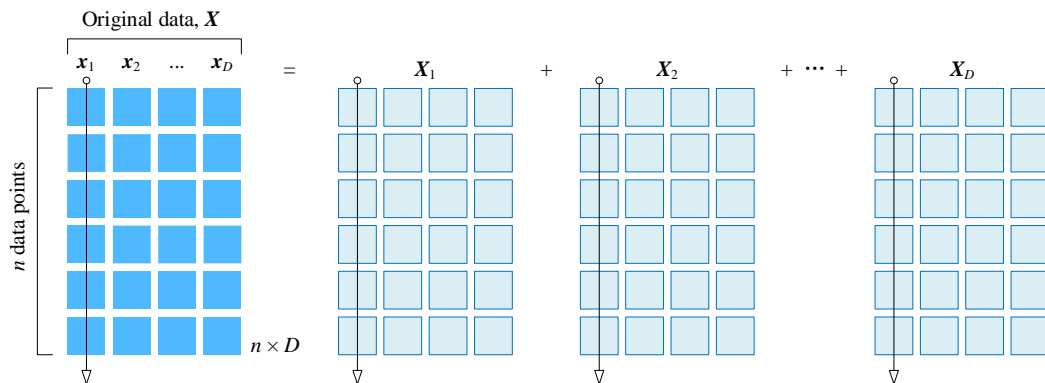


图 7. 层层叠加

二次投影

下面，我们聊聊“二次投影”。

取出 (7) 中向量 X_j 第 j 行元素，对应的运算为：

$$\mathbf{x}_j^{(i)} = \mathbf{x}^{(i)} \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^T = z_{i,j} \mathbf{v}_j^T \quad (13)$$

如 (8) 所示, 上式中 $z_{i,j}$ 就是 $\mathbf{x}^{(i)}$ 正交投影到子空间 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 对应的坐标点, 这是第一次投影, 具体过程如图 5 所示。

而 $z_{i,j} \mathbf{v}_j^T$ 得到的是 $z_{i,j}$ 在 \mathbb{R}^D 的坐标点, 这便是第二次投影。

上述两次投影合并, 得到所谓“二次投影”。整个二次投影的过程如图 8 所示。可以这样理解, $\mathbf{x}^{(i)} \rightarrow z_{i,j}$ 代表“标量投影”; $\mathbf{x}^{(i)} \rightarrow \mathbf{x}^{(i)} \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^T$ 则是“向量投影”。

▲ 注意, 图 8 中 $\mathbf{x}^{(i)}$ 和 $z_{i,j} \mathbf{v}_j^T$ 都用行向量表达坐标点。

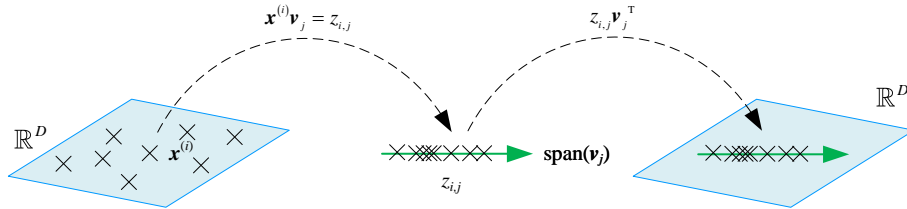


图 8. \mathbb{R}^D 空间数据点先投影到 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$, 再投影回到 \mathbb{R}^D

向量投影：张量积

将 (11) 写成张量积的形式：

$$\mathbf{X}_j = \mathbf{X} \mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j \quad (14)$$

\mathbf{X}_j 就是 \mathbf{X} 经过“降维”到 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 后, 再正交投影到 \mathbb{R}^D 中得到的“像”。 \mathbf{X}_j 也是 \mathbf{X} 在 \mathbf{v}_j 上的向量投影。

张量积 $\mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j$ 本身完成“多维 \rightarrow 一维”+“一维 \rightarrow 多维”这两步投影。

很显然,

$$\text{rank}(\mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j) = 1 \Rightarrow \text{rank}(\mathbf{X}_j) = 1 \quad (15)$$

所以, 在 \mathbb{R}^D 空间中, \mathbf{X}_j 所有数据点在一条直线上, 和 \mathbf{v}_j 平行 (同向或反向)。也就是说, 虽然 \mathbf{X}_j 在 D 维空间 \mathbb{R}^D 中, \mathbf{X}_j 实际上只有 1 个维度, 即 $\dim(\mathbf{v}_j) = \dim(\mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j) = 1$, $\text{rank}(\mathbf{X}_j) = 1$ 。

利用张量积, (10) 可以写成：

$$\mathbf{X} = \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1}_{\mathbf{X}_1} + \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_2}_{\mathbf{X}_2} + \cdots + \underbrace{\mathbf{X} \mathbf{v}_D \otimes \mathbf{v}_D}_{\mathbf{X}_D} \quad (16)$$

可以这样理解上式, \mathbf{X} 分别二次投影 (向量投影) 到规范正交基 $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_D]$ 每个列向量 \mathbf{v}_j 所代表的子空间 $\text{span}(\mathbf{v}_j)$ 中, 获得 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2 \dots \mathbf{X}_D$ 。而 $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2 \dots \mathbf{X}_D$ 层层叠加还原原始数据 \mathbf{X} 。

再进一步，根据 $V^T V = I$ ，我们知道：

$$I = \mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_2 + \cdots + \mathbf{v}_D \otimes \mathbf{v}_D \quad (17)$$

也就是说， $\mathbf{v}_j \otimes \mathbf{v}_j$ 层层叠加得到单位阵 I 。

标准正交基：便于理解

标准正交基是特殊的规范正交基。为了方便理解，我们用标准正交基 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_D]$ 替换 (16) 中的 $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_D]$ ，得到：

$$X = X\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + X\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \cdots + X\mathbf{e}_D \otimes \mathbf{e}_D \quad (18)$$

展开上式中等式右侧第一项得到：

$$X_1 = X\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 = X \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_D \end{bmatrix}}_X \begin{bmatrix} 1 & 0 & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

$X\mathbf{e}_1$ 得到的是 X 的每一行在 $\text{span}(\mathbf{e}_1)$ 这个子空间的坐标，即 \mathbf{x}_1 。而 $X\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1$ 告诉我们的是 $X\mathbf{e}_1$ 在 D 维空间 \mathbb{R}^D 中坐标值。

此后每一项 X_j 可以写成：

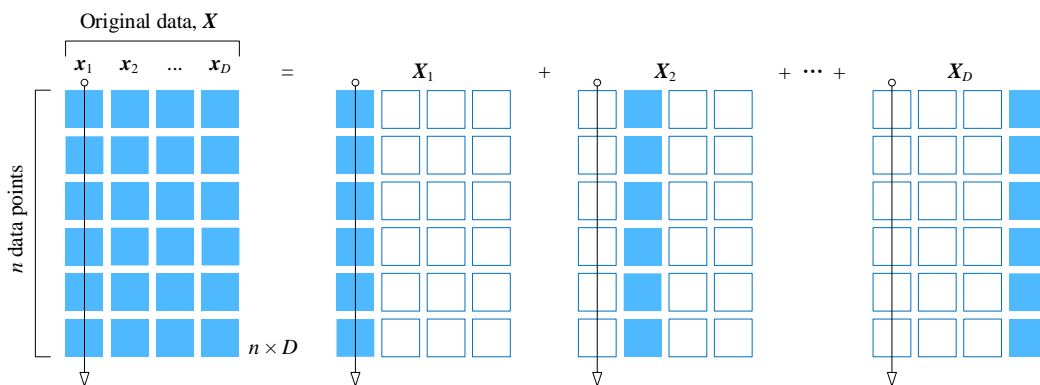
$$\begin{aligned} X_2 &= X\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{x}_2 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \\ &\vdots \\ X_D &= X\mathbf{e}_D \otimes \mathbf{e}_D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \mathbf{x}_D \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (20)$$

也就是说，这个每次计算 $X\mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j$ 投影就是仅保留 X 的第 j 列 \mathbf{x}_j ，其他位置元素置 0。

因此，(18) 可以写成：

$$X = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}}_{X_1} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{x}_2 & \cdots & 0 \end{bmatrix}}_{X_2} + \cdots + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \mathbf{x}_D \end{bmatrix}}_{X_D} \quad (21)$$

图 9 所示为上式二次投影与叠加过程。

图 9. 标准正交基 $[e_1, e_2, \dots, e_D]$ 中二次投影与叠加

回过头再看 (9)，我们知道这个运算过程代表先从标准正交基 $[e_1, e_2, \dots, e_D]$ 到规范正交基 $[v_1, v_2, \dots, v_D]$ 的投影，然后再投影回到标准正交基 $[e_1, e_2, \dots, e_D]$ ：

$$X \xrightarrow{V} XV \xrightarrow{V^T} X \quad (22)$$

看到这里，有些读者有可能已经晕头转向。下面利用鸢尾花数据集做例子，帮大家更直观理解本节内容。

10.3 二特征数据投影：标准正交基

本节以二特征矩阵为例讲解何谓“二次投影”和“层层叠加”。数据矩阵选取鸢尾花数据集前两列——花萼长度、花萼宽度，这样数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 的形状为 150×2 。

水平方向投影

如图 10 所示， $X_{150 \times 2}$ 向水平方向投影，即 $X_{150 \times 2}$ 向 e_1 投影。以图中红点 A 为例， A 的坐标为 $(5, 2)$ ，它在 e_1 方向上的投影坐标为：

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 5 \quad (23)$$

e_1

▲ 注意，5 代表的是 A 在 $\text{span}(e_1)$ 空间中的坐标值，而 $\text{span}(e_1)$ 显然为一维空间。

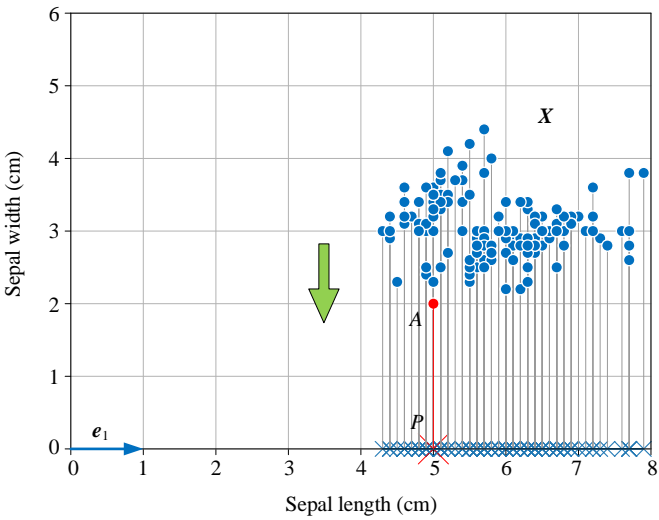


图 10. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_1 投影，一次投影

如图 11 热图所示， $X_{150 \times 2}$ 向 e_1 投影结果相当于保留了 $X_{150 \times 2}$ 第一列数据：

$$z_1 = X e_1 = x_1$$

(24)

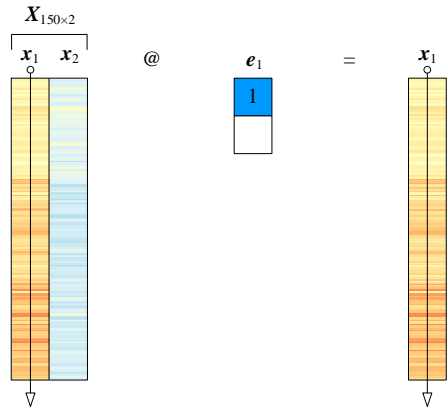


图 11. 数据热图，二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_1 投影，一次投影

大家可能会好奇，既然图 10 中 $X_{150 \times 2}$ 向水平方向投影结果都可以画在图 10 直角坐标系中，也就是在二维空间 $\text{span}(e_1, e_2)$ 中，这些投影点一定有其二维坐标值。

很明显，以 A 为例，A 在横轴投影点 P 在 $\text{span}(e_1, e_2)$ 的坐标值为 (5, 0)。这个结果是怎么得到的？

这就用到了本章前文讲到的“二次投影”，相当于在 (23) 基础上再次投影。第二次投影相当于“升维”，从一维升到二维。

以点 A 为例，“二次投影”对应的计算为：

$$[5 \ 2]e_1 \otimes e_1 = [5 \ 2]e_1 e_1^T = [5 \ 2] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = [5 \ 0] \quad (25)$$

上式对应的计算如图 12 所示。

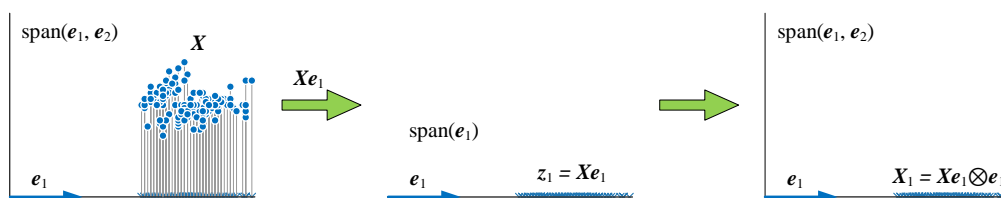


图 12. 二特征数据矩阵 X 向 e_1 投影，二次投影

X 在 e_1 二次投影对应 $\text{span}(e_1, e_2)$ 坐标值为 X_1 ：

$$X_1 = Xe_1 \otimes e_1 = Xe_1 e_1^T = X \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = [x_1 \ 0] \quad (26)$$

图 13 所示为上述运算对应热图。

很容易判断，(26) 上式中 $e_1 \otimes e_1$ 的行列式值为 0，即 $\det(e_1 \otimes e_1) = 0$ 。也就是说这个映射过程存在降维，映射矩阵不可逆，即几何操作不可逆。

▲ 值得注意的是，从 x_1 到 $X_1 = [x_1, 0]$ 这种“升维”，不代表数据信息增多。显然，上式中 X_1 的秩仍为 1，即 $\text{rank}(X_1)$ 。

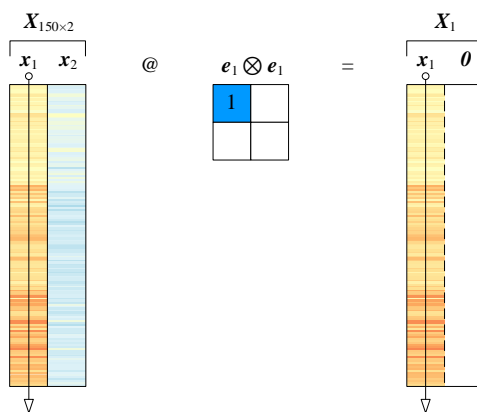


图 13. 数据热图，二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_1 投影，二次投影

竖直方向投影

如图 14 所示, $X_{150 \times 2}$ 向竖直方向投影, 即 $X_{150 \times 2}$ 向 e_2 投影。还是以 A 点为例, $A(5, 2)$ 在 e_2 方向上的标量投影为:

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 2 \quad (27)$$

e_2

2 代表的是 A 在 $\text{span}(e_2)$ 空间中的坐标值, $\text{span}(e_2)$ 同样为一维空间。图 15 为上述运算的热图。

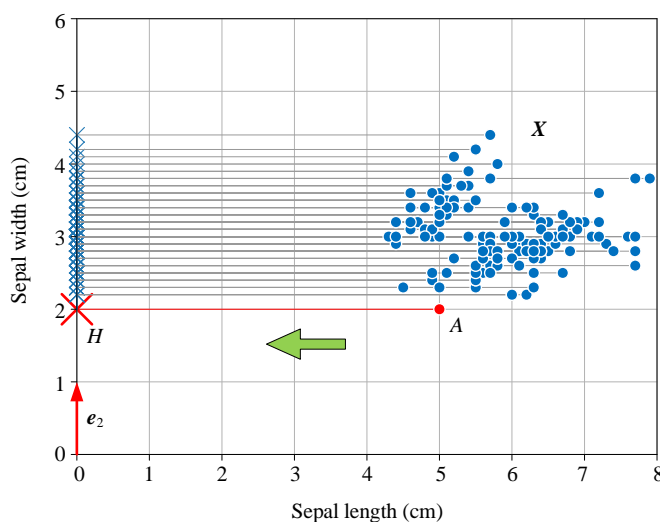


图 14. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_2 方向标量投影, 一次投影

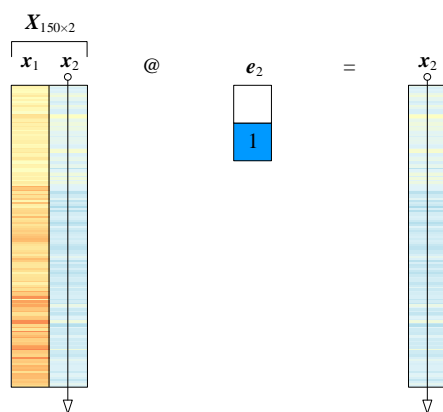


图 15. 数据热图, 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_2 投影, 一次投影

同样利用“二次投影”，得到 A 在竖直方向投影点 H 在 $\text{span}(e_1, e_2)$ 的坐标值为 $(0, 2)$ ：

$$[5 \ 2]e_2 \otimes e_2 = [5 \ 2]e_2 e_2^T = [5 \ 2] \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = [0 \ 2] \quad (28)$$

上式对应的计算如图 16 所示。

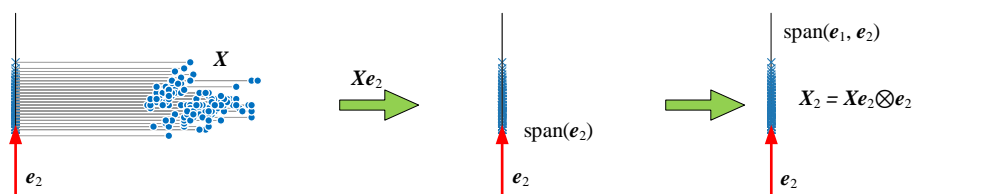


图 16. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_2 方向标量投影，二次投影

$X_{150 \times 2}$ 在 e_2 二次投影得到矩阵 X_2 ：

$$X_2 = Xe_2 \otimes e_2 = Xe_2 e_2^T = X \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (29)$$

上式对应的热图运算为图 17。 X_2 第一列向量为 $\mathbf{0}$ ，第二列向量为 x_2 。

(29) 中 $e_2 \otimes e_2$ 的行列式值为 0，即 $\det(e_2 \otimes e_2) = 0$ 。

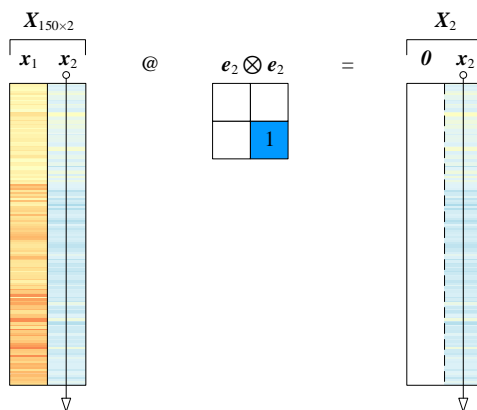


图 17. 数据热图，二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 e_2 投影，二次投影

叠加

如图 18 所示，以 A 为例， $P(5, 0)$ 和 $H(0, 2)$ 叠加得到点 A 坐标 $(5, 2)$ 。这也相当于两个向量叠加得到一个向量，即：

$$\begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (30)$$

或,

$$\begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}^T + \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \end{bmatrix}^T \quad (31)$$

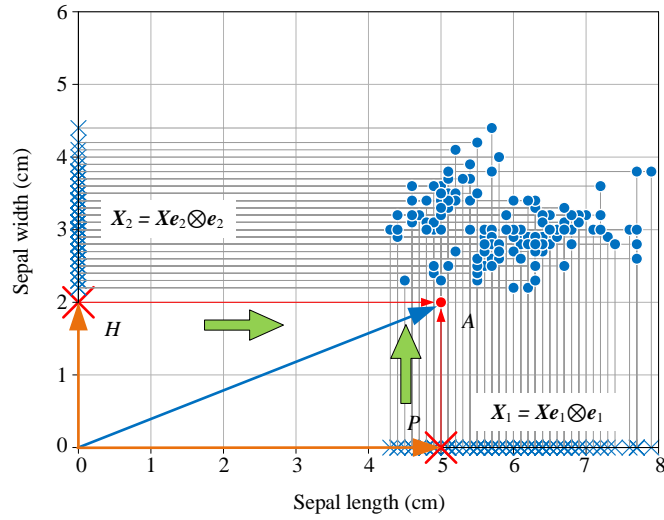


图 18. 数据叠加还原散点图

如图 19 所示, X_1 和 X_2 叠加还原 $X_{150 \times 2}$:

$$\begin{aligned} X_{150 \times 2} &= X_1 + X_2 \\ &= X(e_1 \otimes e_1 + X e_2 \otimes e_2) \\ &= X(e_1 e_1^T + e_2 e_2^T) \\ &= X \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) = XI \end{aligned} \quad (32)$$

图 20 所示为上述运算对应的热图。

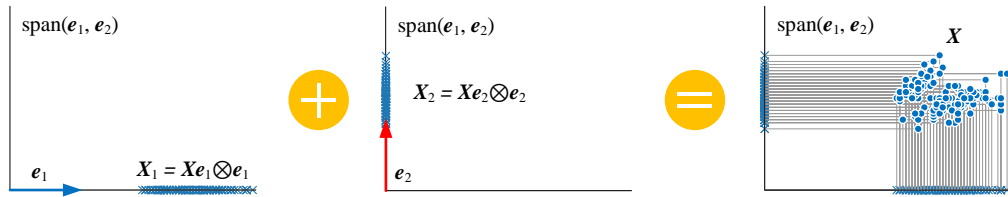
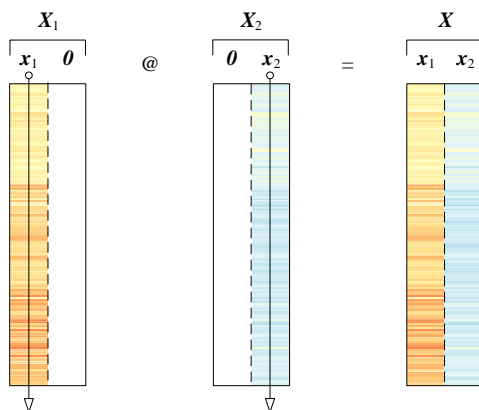


图 19. 数据叠加还原 $X_{150 \times 2}$

图 20. 数据热图，叠加还原 $X_{150 \times 2}$

10.4 二特征数据投影：规范正交基

本节分析 $X_{150 \times 2}$ 在三个不同规范正交基投影情况。

第一个规范正交基

给定如下规范正交基 $V = [v_1, v_2]$:

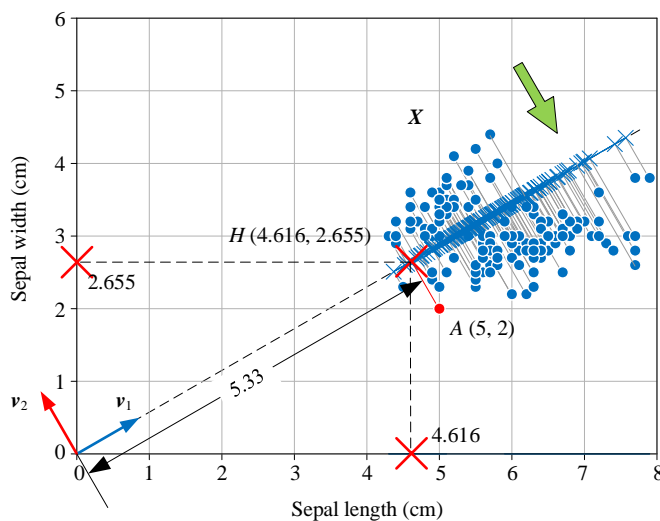
$$V = [v_1 \quad v_2] = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix} \quad (33)$$

从几何变换角度来上， V 就是一个旋转矩阵。大家自己很容易计算得到 V 的行列式值为 1，即 $\det(V) = 1$ 。

如图 21 所示，同样以点 $A(5, 2)$ 为例， A 在 v_1 方向标量投影为：

$$[5 \quad 2] \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}}_{v_1} \approx 5.33 \quad (34)$$

也就是说， A 在 $\text{span}(v_1)$ 投影 H 的坐标值为 5.33，对应向量可以写成 $5.33v_1$ 。

图 21. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 v_1 投影

通过二次投影获得 H 在 $\text{span}(e_1, e_2)$ 坐标值：

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} v_1 \otimes v_1 = \begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} v_1 v_1^T = \begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/4 & \sqrt{3}/4 \\ \sqrt{3}/4 & 1/4 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 4.616 & 2.665 \end{bmatrix} \quad (35)$$

这就是 H 在图 21 中坐标值。很容易计算，(35) 中 $v_1 \otimes v_1$ 的行列式值为 0，即 $\det(v_1 \otimes v_1) = 0$ 。

$X_{150 \times 2}$ 在 v_1 投影 z_1 为：

$$z_1 = X v_1 = \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}}_X \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}}_{v_1} \approx 0.866x_1 + 0.5x_2 \quad (36)$$

即， z_1 相当于 x_1 和 x_2 的线性组合。

$X_{150 \times 2}$ 在 v_1 二次投影结果 X_1 为：

$$X_1 = X v_1 \otimes v_1 = X v_1 v_1^T \approx \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}}_X \begin{bmatrix} 0.750 & 0.433 \\ 0.433 & 0.250 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.750x_1 + 0.433x_2 & 0.433x_1 + 0.250x_2 \end{bmatrix} \quad (37)$$

如图 22 所示，同样以点 $A(5, 2)$ 为例， A 在 v_2 方向标量为：

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{v_2} \approx -0.7679 \quad (38)$$

即 A 在 $\text{span}(v_2)$ 投影点的坐标值为 -0.7679 ，对应向量可以写成 $-0.7679v_2$ 。通过二次投影获得投影点坐标值 (图 22 中 \times)：

$$[5 \ 2]v_2 \otimes v_2 = [5 \ 2]v_2 v_2^T = [5 \ 2] \begin{bmatrix} 1/4 & -\sqrt{3}/4 \\ -\sqrt{3}/4 & 3/4 \end{bmatrix} \approx [0.384 \ -0.665] \quad (39)$$

(39) 中 $v_2 \otimes v_2$ 的行列式值为 0，即 $\det(v_2 \otimes v_2) = 0$ 。

(35) 和 (39) 之和还原 A 坐标值 (5, 2)：

$$[5 \ 2](v_1 \otimes v_1 + v_2 \otimes v_2) = [5 \ 2] \left\{ \begin{bmatrix} 3/4 & \sqrt{3}/4 \\ \sqrt{3}/4 & 1/4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/4 & -\sqrt{3}/4 \\ -\sqrt{3}/4 & 3/4 \end{bmatrix} \right\} = [5 \ 2] \quad (40)$$

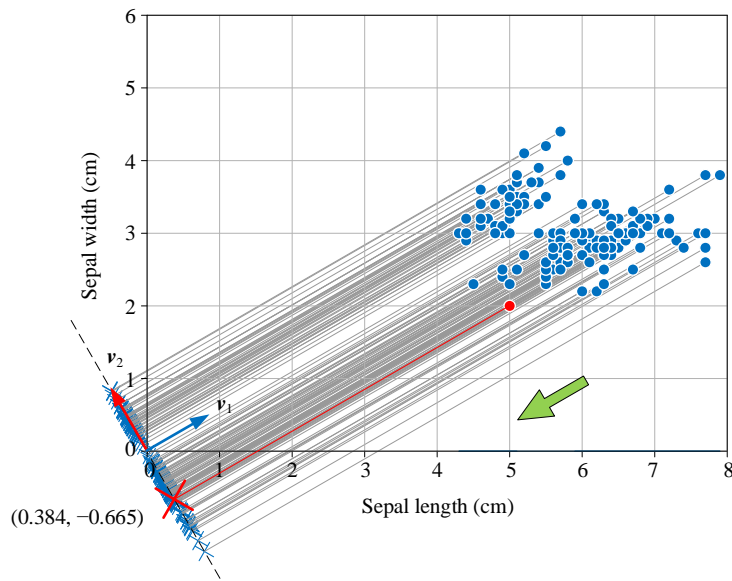


图 22. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 v_2 投影

$X_{150 \times 2}$ 在 v_2 投影 z_2 为：

$$z_2 = Xv_2 = \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}}_X \underbrace{\begin{bmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}}_{v_2} \approx -0.5x_1 + 0.866x_2 \quad (41)$$

z_2 也是 x_1 和 x_2 的线性组合。

$X_{150 \times 2}$ 在 v_2 二次投影 X_2 为：

$$X_2 = Xv_2 \otimes v_2 = Xv_2 v_2^T \approx \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}}_X \begin{bmatrix} 0.250 & -0.433 \\ -0.433 & 0.750 \end{bmatrix} = [0.250x_1 - 0.433x_2 \quad -0.433x_1 + 0.750x_2] \quad (42)$$

(37) 和 (42) 叠加还原 X ：

$$\mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_2 = \mathbf{X}\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1 + \mathbf{X}\mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_2 = \mathbf{X} \left\{ \begin{bmatrix} 0.750 & 0.433 \\ 0.433 & 0.250 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.250 & -0.433 \\ -0.433 & 0.750 \end{bmatrix} \right\} = \mathbf{X} \quad (43)$$

第二个规范正交基

给定如下规范正交基 $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2]$:

$$\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1 \quad \mathbf{w}_2] = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \quad (44)$$

图 23 和图 24 所示为二特征数据矩阵 $\mathbf{X}_{150 \times 2}$ 向 \mathbf{w}_1 和 \mathbf{w}_2 投影。请按照本节之前分析 \mathbf{V} 的逻辑，自行分析数据在 \mathbf{W} 中的投影，并计算 \mathbf{W} 的行列式值。

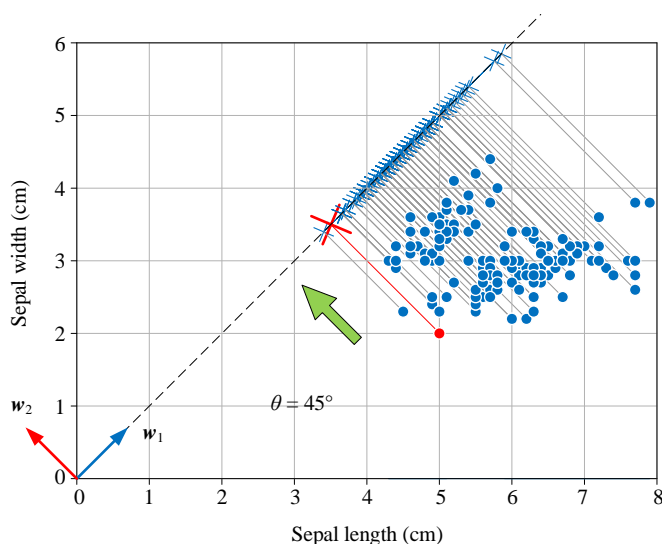
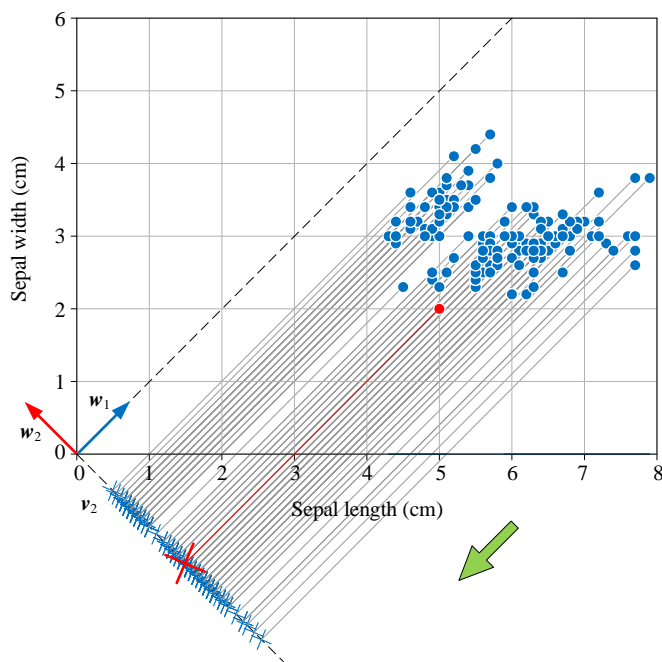


图 23. 二特征数据矩阵 $\mathbf{X}_{150 \times 2}$ 向 \mathbf{w}_1 投影

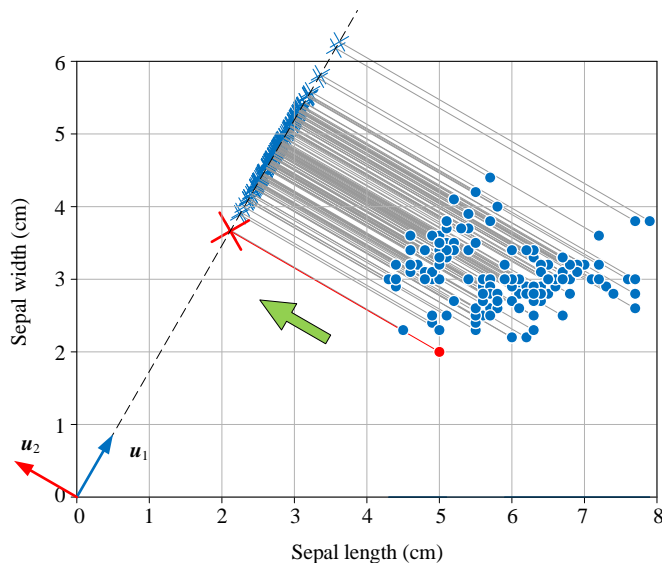
图 24. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 w_2 投影

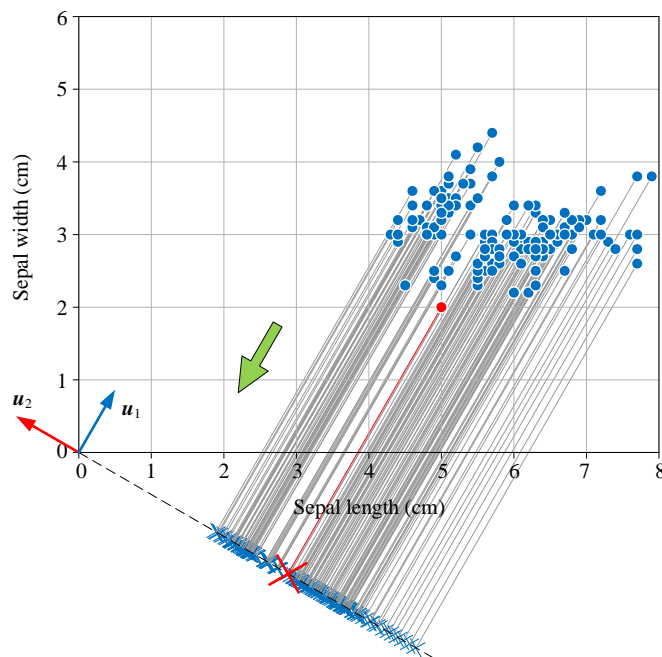
第三个规范正交基

给定如下规范正交基 $U = [u_1, u_2]$:

$$U = [u_1 \quad u_2] = \begin{bmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (45)$$

图 25 和图 26 所示为二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 u_1 和 u_2 投影。请大家分析数据在 U 中的投影，并计算 U 的行列式值。

图 25. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 u_1 投影

图 26. 二特征数据矩阵 $X_{150 \times 2}$ 向 u_2 投影

10.5 四特征数据投影：标准正交基

本章最后两节以四特征数据矩阵为例，扩展前文分析思路。

本节先从最简单的标准正交基 $[e_1, e_2, \dots, e_D]$ 入手。

一次投影：标量投影

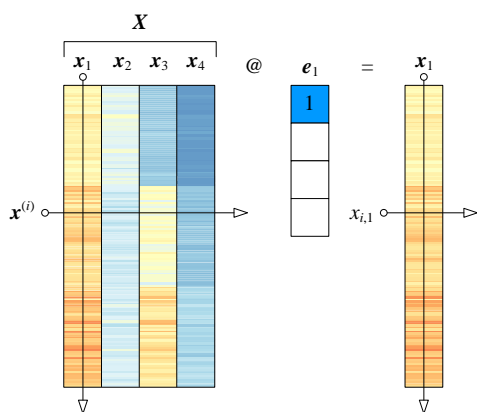
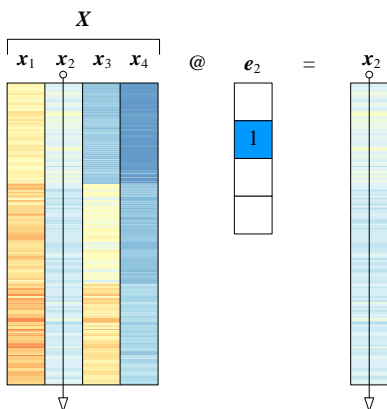
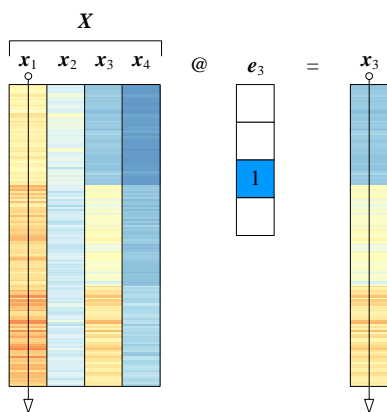
前文提到过，一次投影实际上就是“标量投影”。图 27 所示为鸢尾花数据集矩阵 X 在 e_1 方向上标量投影的运算热图。

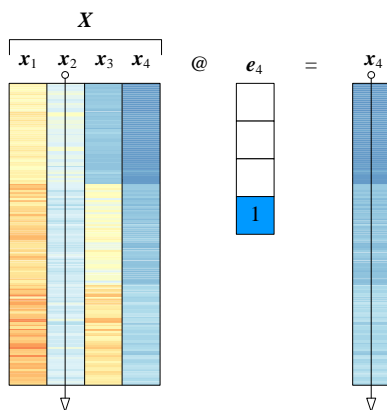
从行向量角度来看， $\mathbf{x}^{(i)} e_1 \rightarrow x_{i,1}$ 代表 \mathbb{R}^D 空间坐标值 $\mathbf{x}^{(i)}$ 投影到 $\text{span}(e_1)$ 这个子空间后，结果坐标值为 $x_{i,1}$ 。

▲ 再次强调， $x_{i,1}$ 是 $\mathbf{x}^{(i)}$ 在 $\text{span}(e_1)$ 的坐标值。

从列向量角度来看， $[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4] e_1 \rightarrow \mathbf{x}_1$ ，是一个线性组合过程。而 $e_1 = [1, 0, 0, 0]^T$ ，所以组合的结果只保留了鸢尾花数据集第一列 \mathbf{x}_1 ，即花萼长度，这个特征的所有样本数据。

请大家按照这个思路分析图 28、图 29、图 30 三幅热图运算。

图 27. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_1 投影，一次投影图 28. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_2 投影，一次投影图 29. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_3 投影，一次投影

图 30. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_4 投影，一次投影

二次投影

如前文所述，本章所谓的“二次投影”实际上就是向量投影。如图 31 所示， X 向 e_1 方向向量投影结果就是 X 和 $e_1 \otimes e_1$ 的矩阵乘积。乘积结果是，只保留鸢尾花数据集第一列——花萼长度，其他数据均置 0。请大家按照这个思路自行分析图 32、图 33、图 34。此外，容易计算 $e_1 \otimes e_1$ 、 $e_2 \otimes e_2$ 、 $e_3 \otimes e_3$ 、 $e_4 \otimes e_4$ 的行列式值都为 0。

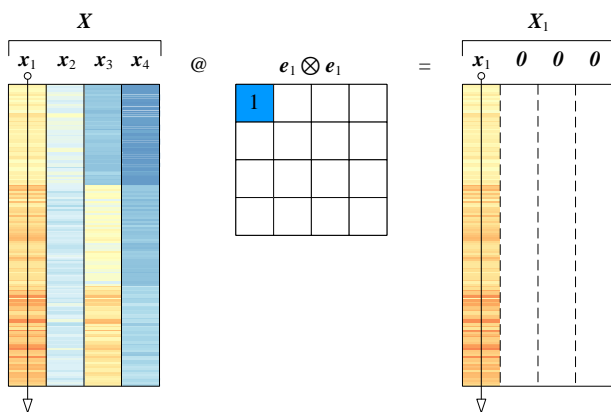
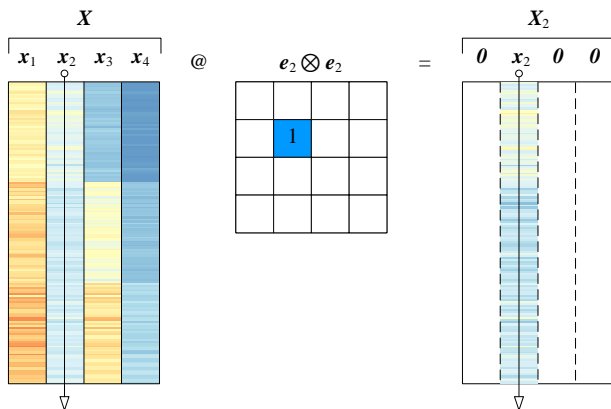
图 31. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_1 方向向量投影，二次投影

图 32. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_2 方向向量投影，二次投影

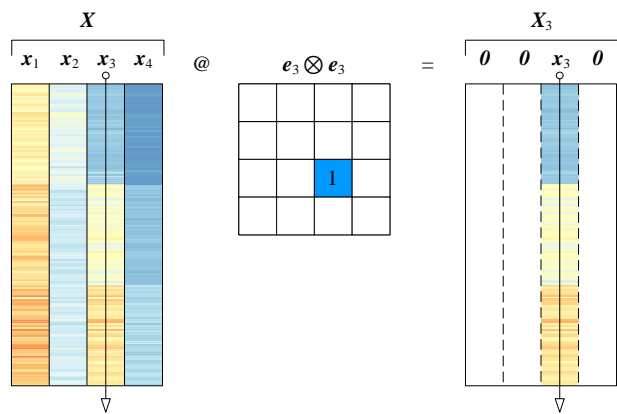


图 33. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_3 方向向量投影，二次投影

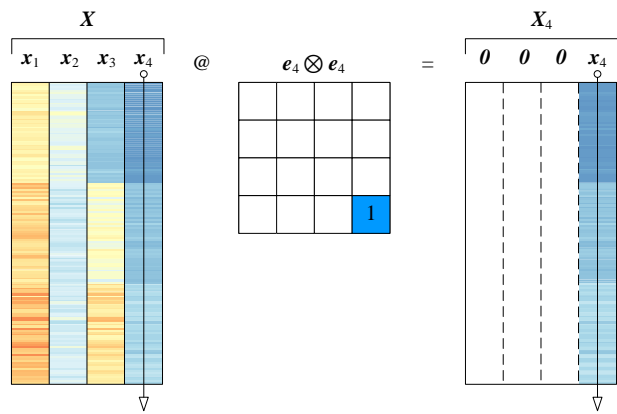


图 34. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 e_4 方向向量投影，二次投影

两个方向投影

本节之前提到的都是向单一方向投影。下面，我们用一个例子说明向两个方向投影。

如图 35 所示， X 向 $[e_1, e_2]$ 方向标量投影，这个过程也相当于降维，从 4 维降到 2 维，只保留了鸢尾花花萼长度、花萼宽度两个特征。

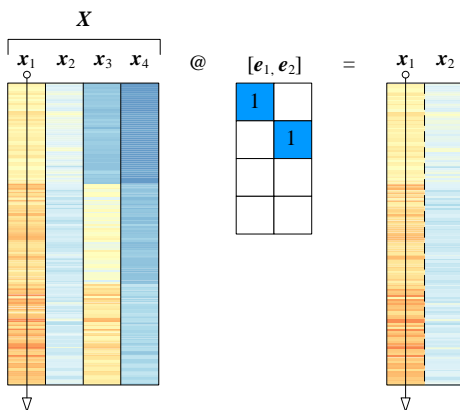
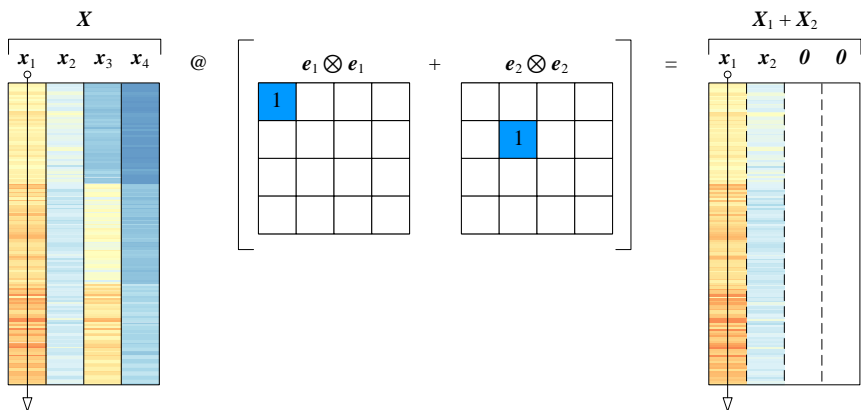
图 35. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 $[e_1, e_2]$ 方向标量投影

图 36 所示为 X 向 $[e_1, e_2]$ 方向向量投影，结果相当于图 31 和图 32 结果“叠加”，即 $X_1 + X_2$ 。很明显， $X_1 + X_2$ 并没有还原 X 。

图 36. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 $[e_1, e_2]$ 方向向量投影

层层叠加：还原原始矩阵

本章前文 (12) 告诉我们，数据矩阵 X 在规范正交基 $[v_1, v_2, \dots, v_D]$ 中每个方向上向量投影层层叠加可以完全还原原始数据。而标准正交基 $[e_1, e_2, \dots, e_D]$ 可以视作特殊的规范正交基。

观察图 37 得知，要想完整还原 X ，需要图 31、图 32、图 33、图 34 四副热图叠加，即 $X_1 + X_2 + X_3 + X_4$ 。显然， X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 这四个矩阵的秩都是 1。

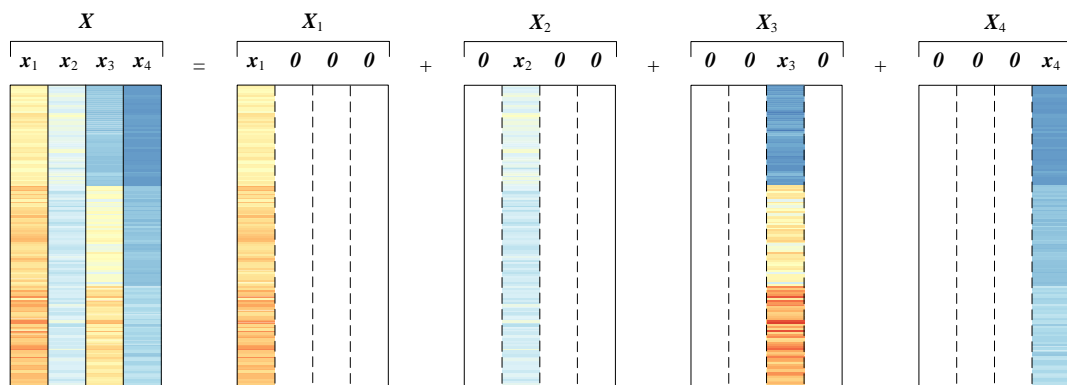
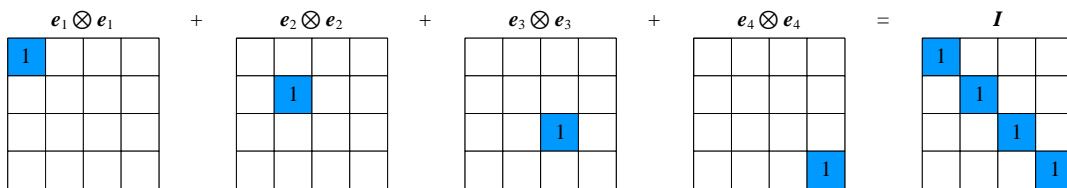
图 37. 投影数据矩阵的层层叠加还原数据矩阵 $X_{150 \times 4}$

图 38 是张量积层层叠加得到单位矩阵 I ，它是数据还原的另外一个侧面：

$$\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_4 \otimes \mathbf{e}_4 = \mathbf{I} \quad (46)$$

图 38. 张量积的层层叠加还原 4×4 单位矩阵

10.6 四维数据投影：规范正交基

有了上一节内容作为基础，这一节提高难度，我们用一个规范正交基重复上一节所有计算。

一个“无数里挑一”的规范正交基

先别问怎么办到的。假设我们恰好找到了一个 4×4 规范正交基 V ，具体如下：

$$V = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \mathbf{v}_3 \quad \mathbf{v}_4] = \begin{bmatrix} 0.751 & 0.284 & 0.502 & 0.321 \\ 0.380 & 0.547 & -0.675 & -0.317 \\ 0.513 & -0.709 & -0.059 & -0.481 \\ 0.168 & -0.344 & -0.537 & 0.752 \end{bmatrix} \quad (47)$$

图 39 所示为规范正交基 V 乘其转置 V^T 得到单位矩阵。大家可以自己试着验算上式是否满足 $VV^T = I$ ，即 V 每一列列向量都是单位向量，且 V 的列向量两两正交。上式， V 仅保留小数点后 3 位， VV^T 结果非常接近 I 。

从几何角度来看，规范正交基 V 对应的几何操作是四维空间旋转。

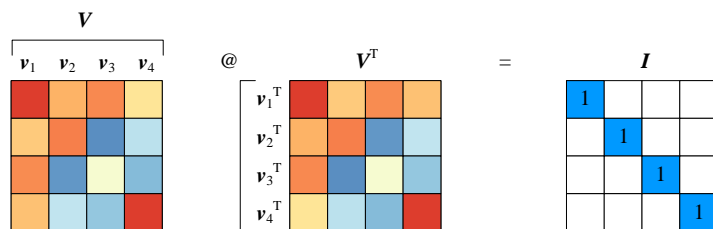


图 39. 规范正交基 V 乘其转置得到 4×4 单位矩阵

V 中的像

如图 40 所示，直接将 X 投影到规范正交基 V ，得到 $Z = XV$ 。 Z 就是 X 在 V 中的像，根据 $Xv_j = z_j$ ，下面我们逐一分析矩阵 Z 的列向量。

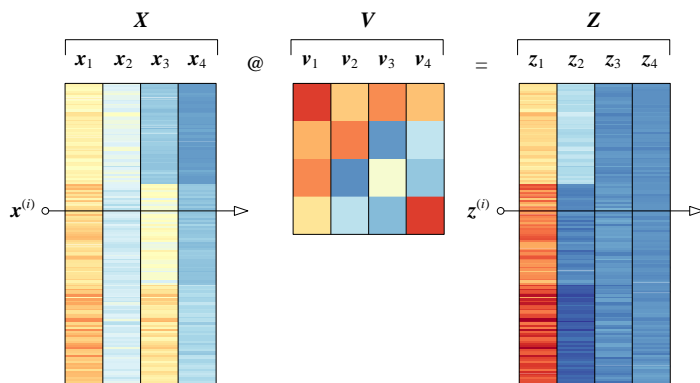


图 40. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 投影到规范正交基 V 得到 Z

第 1 列向量 v_1

图 41 所示为鸢尾花数据集矩阵 X 在 v_1 方向上标量投影的运算热图。

从行向量角度来看， $x^{(i)}v_1 \rightarrow z_{i,1}$ 代表 \mathbb{R}^D 空间坐标值 $x^{(i)}$ 投影到 $\text{span}(v_1)$ 这个子空间后坐标值变成 $z_{i,1}$ 。

从列向量角度来看， $[x_1, x_2, x_3, x_4]v_1 \rightarrow z_1$ ，是一个线性组合过程，即：

$$z_1 = Xv_1 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.751 \\ 0.380 \\ 0.513 \\ 0.168 \end{bmatrix} = 0.751x_1 + 0.380x_2 + 0.513x_3 + 0.168x_4 \quad (48)$$

上式说明, 0.7512 倍 x_1 、0.380 倍 x_2 、0.513 倍 x_3 、0.168 倍 x_4 合成得到了向量 z_1 。

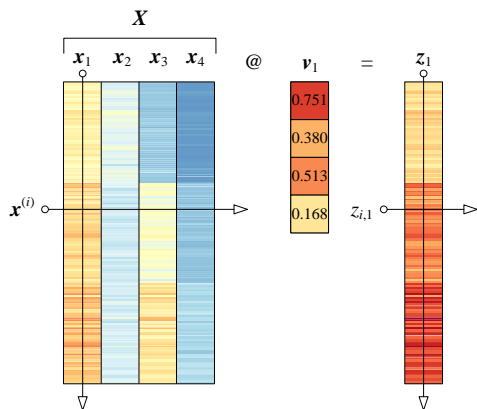


图 41. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_1 方向标量投影, 一次投影

如图 42 所示, z_1 再乘 v_1^T , 便得到 X_1 。不难理解, X_1 的每一列都是 z_1 乘一个标量系数。显然, X_1 的秩为 1, 即 $\text{rank}(X_1) = 1$ 。总结来说, 图 41 和图 42 用了两步完成了“二次投影”, 即向量投影。

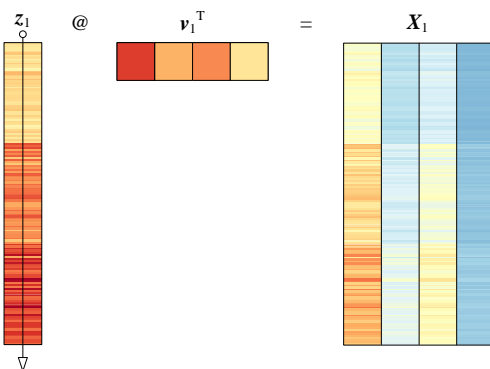


图 42. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 乘 v_1^T 得到 X_1

下面, 我们用向量张量积方法完成同样的计算。

首先计算张量积 $v_1 \otimes v_1$:

$$v_1 \otimes v_1 = v_1 v_1^T = \begin{bmatrix} 0.751 \\ 0.380 \\ 0.513 \\ 0.168 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0.751 & 0.380 & 0.513 & 0.168 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.564 & 0.285 & 0.385 & 0.126 \\ 0.285 & 0.144 & 0.194 & 0.063 \\ 0.385 & 0.194 & 0.263 & 0.086 \\ 0.126 & 0.063 & 0.086 & 0.028 \end{bmatrix} \quad (49)$$

图 43 所示为上述运算热图。很容易发现, 张量积为对称矩阵。请大家自行计算张量积的秩是否为 1。

⚠ 注意, (49) 上式仅仅保留小数点后 3 位数值。

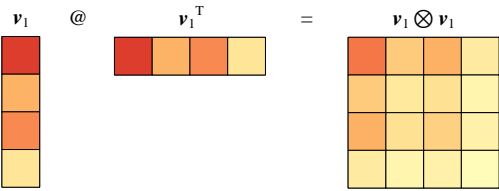


图 43. 计算张量积 $v_1 \otimes v_1$

图 44 所示为 X 和张量积 $v_1 \otimes v_1$ 乘积。几何视角，即 X 向 v_1 方向向量投影得到 X_1 ，即所谓“二次投影”。

请大家特别注意一点， X 和 X_1 在热图上已经非常接近。这是因为我们在设定 v_1 时，有特殊的“讲究”。我们将会在本书下一个板块——矩阵分解，和大家深入探讨如何获得这个特殊的 v_1 。

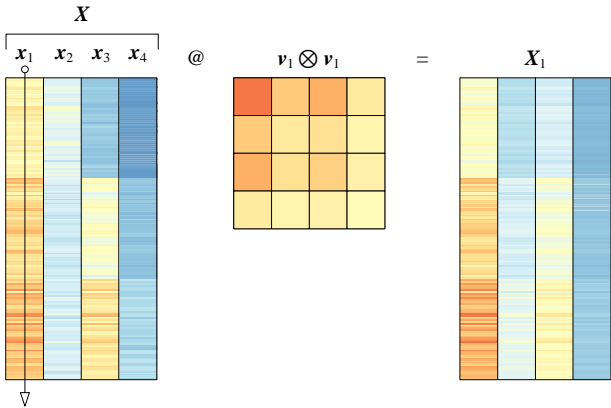


图 44. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_1 方向向量投影，二次投影

第 2 列向量 v_2

图 45 和图 46 分别展示获得 z_2 和 X_2 的过程。请大家根据之前分析 v_1 的思路自行分析这两图。

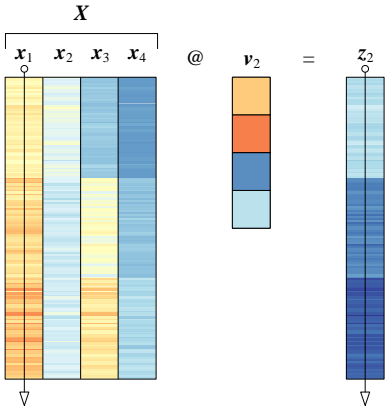


图 45. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_2 投影，一次投影

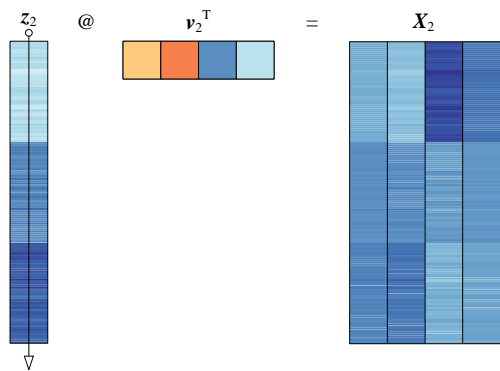


图 46. z_2 乘 v_2^T 得到 X_2

同样，利用张量积完成 $X_{150 \times 4}$ 向 v_2 二次投影。大家自行计算张量积 $v_2 \otimes v_2$ 具体值，按照前文思路分析图 47 和图 48。有必要指出一点，对比 X_1 ， X_2 热图和 X 相差很大。

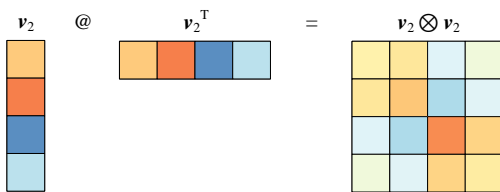


图 47. 计算张量积 $v_2 \otimes v_2$

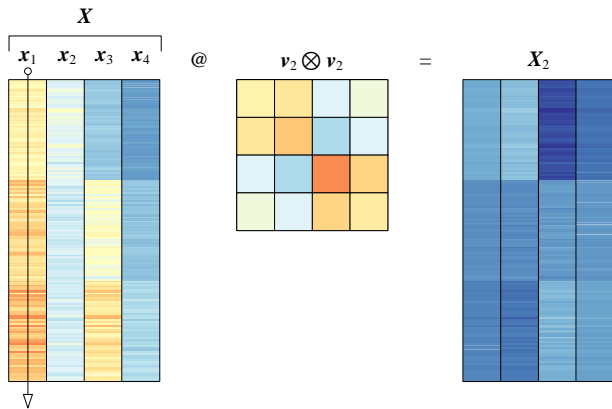
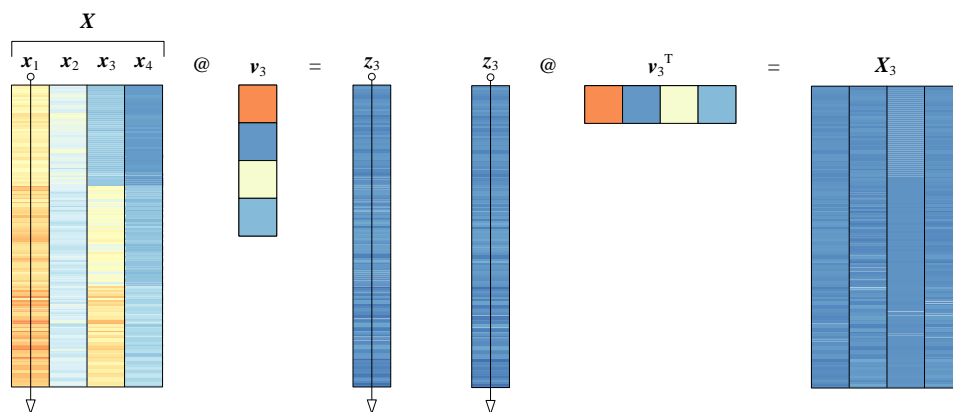
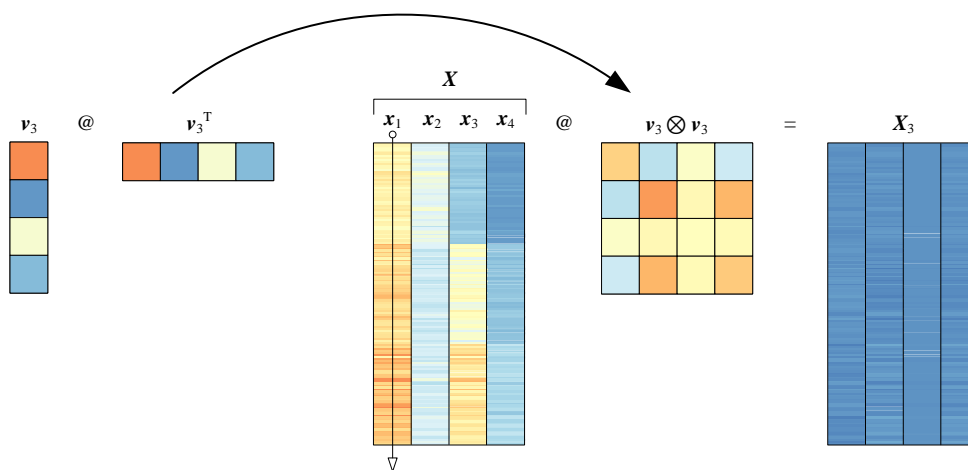


图 48. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_2 投影，二次投影

第 3 列向量 v_3

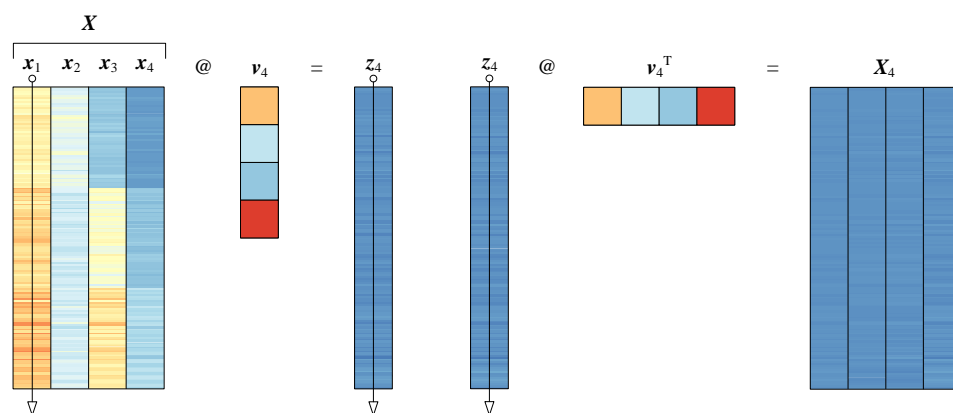
大家自行分析图 49、图 50。

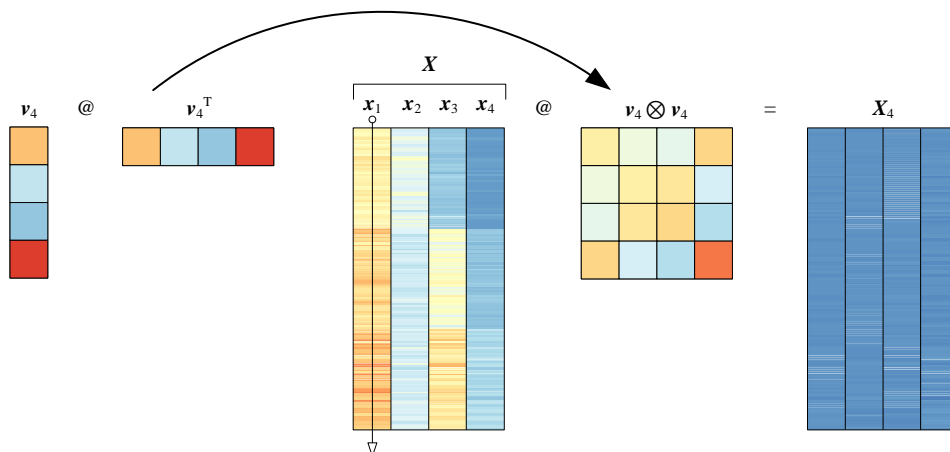
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

图 49. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_3 投影，一次投影，二次投影图 50. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_3 投影，二次投影

第 4 列向量 v_4

大家自行分析图 51、图 52。特别注意比较 X 和 X_4 的热图差异。

图 51. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_4 投影，一次投影和二次投影

图 52. 四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$ 向 v_4 投影，二次投影

层层叠加

类似前文，我们也从两个视角讨论层层叠加还原原矩阵。

如图 53 所示，数据矩阵 X 在规范正交基 $[v_1, v_2, \dots, v_D]$ 中每个方向上向量投影层层叠加完全还原原始数据。

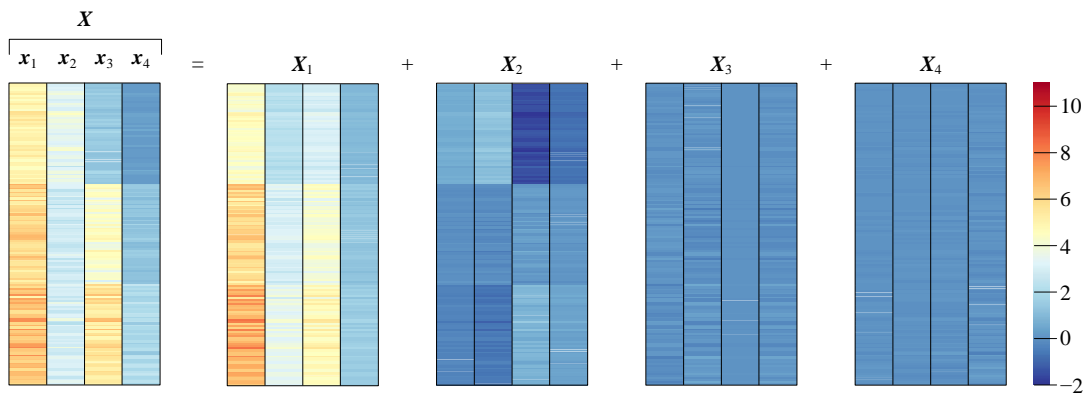
图 53. 层层叠加还原四特征数据矩阵 $X_{150 \times 4}$

图 53 告诉我们，要想完整还原 X ，需要四副热图叠加，即 $X_1 + X_2 + X_3 + X_4$ 。我们已经很清楚 X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 这四个矩阵的秩都是 1，而 X 就是这四个秩为 1 的不同矩阵层层叠加之和。

前文已经提到 X_1 已经非常接近 X 。也就是说，我们可以用 X_1 近似 X 。特别考虑到 X_1 的秩为 1，即 $\text{rank}(X_1) = 1$ 。也就是说， X_1 的四个列向量之间存在倍数关系，即，

$$X_1 = z_1 v_1^T = z_1 \begin{bmatrix} 0.751 & 0.380 & 0.513 & 0.168 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.751 z_1 & 0.380 z_1 & 0.513 z_1 & 0.168 z_1 \end{bmatrix} \quad (50)$$

建议大家仔细对比图 53 中 X 、 X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 这五幅热图色差，它们采用完全相同的色谱。

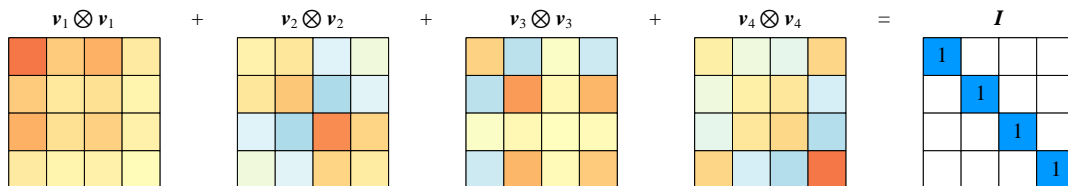


图 54. 张量积层层累加获得 4×4 单位矩阵

如图 54 所示，这四个张量积层层叠加得到单位矩阵，即：

$$\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3 \otimes \mathbf{v}_3 + \mathbf{v}_4 \otimes \mathbf{v}_4 = \mathbf{I} \quad (51)$$

如前文所述，(51) 是数据还原的另外一个侧面。本章前文提到 (9)，矩阵乘单位矩阵结果为其本身，即 $\mathbf{XI} = \mathbf{X}$ 。而单位矩阵 \mathbf{I} 可以按 (51) 分解。这也就是说，张量积层层叠加得到了单位矩阵 \mathbf{I} ，等价于还原原始数据。

容易计算 $\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_1$ 、 $\mathbf{v}_2 \otimes \mathbf{v}_2$ 、 $\mathbf{v}_3 \otimes \mathbf{v}_3$ 、 $\mathbf{v}_4 \otimes \mathbf{v}_4$ 的行列式值都为 0。



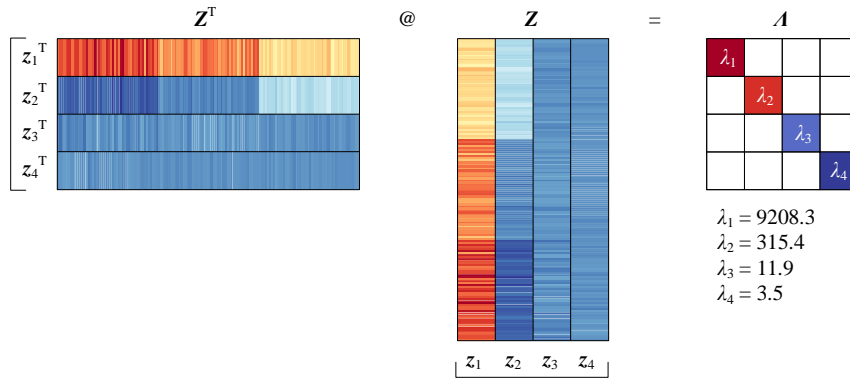
Bk4_Ch10_01.py 绘制本章前文大部分热图。

10.7 数据正交化

两个格拉姆矩阵

本节再回过头来分析图 40 中数据矩阵 \mathbf{Z} 。如图 55 所示，矩阵 \mathbf{Z} 转置乘自身得到 \mathbf{Z} 的格拉姆矩阵：

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1^T \\ \mathbf{z}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{z}_D^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_1^T \mathbf{z}_D \\ \mathbf{z}_2^T \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2^T \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_2^T \mathbf{z}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{z}_D^T \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_D^T \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_D^T \mathbf{z}_D \end{bmatrix} \quad (52)$$

图 55. 矩阵 Z 的格拉姆矩阵

(52) 写成向量内积形式：

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1 \cdot \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_1 \cdot \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_1 \cdot \mathbf{z}_D \\ \mathbf{z}_2 \cdot \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2 \cdot \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_2 \cdot \mathbf{z}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{z}_D \cdot \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_D \cdot \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_D \cdot \mathbf{z}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_D \rangle \\ \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{z}_D, \mathbf{z}_1 \rangle & \langle \mathbf{z}_D, \mathbf{z}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{z}_D, \mathbf{z}_D \rangle \end{bmatrix} \quad (53)$$

观察图 55，发现 $\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}$ 恰好是对角方阵，即：

$$\mathbf{Z}^T \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D \end{bmatrix} = \mathbf{A} \quad (54)$$

这说明， \mathbf{Z} 的列向量两两正交，即：

$$\mathbf{z}_i^T \mathbf{z}_j = \mathbf{z}_j^T \mathbf{z}_i = \mathbf{z}_i \cdot \mathbf{z}_j = \mathbf{z}_j \cdot \mathbf{z}_i = \langle \mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j \rangle = \langle \mathbf{z}_j, \mathbf{z}_i \rangle = 0, \quad i \neq j \quad (55)$$

对比 \mathbf{X} 的格拉姆矩阵：

$$\begin{aligned} \mathbf{G} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{x}_D^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_D \\ \mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{x}_D^T \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_D^T \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_D^T \mathbf{x}_D \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_D \\ \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_D \cdot \mathbf{x}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1 \rangle & \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_D \rangle \\ \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 \rangle & \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_D \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \mathbf{x}_D, \mathbf{x}_1 \rangle & \langle \mathbf{x}_D, \mathbf{x}_2 \rangle & \cdots & \langle \mathbf{x}_D, \mathbf{x}_D \rangle \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (56)$$

图 56 所示为计算矩阵 \mathbf{X} 的格拉姆矩阵的热图。此外，请大家注意一点，图 56 中矩阵 \mathbf{G} 的迹，即对角线元素之和， $\text{tr}(\mathbf{G}) = 9539.29$ 。而图 55 中矩阵 \mathbf{A} 的迹和 \mathbf{G} 的迹相同， $\text{tr}(\mathbf{G}) = \text{tr}(\mathbf{A}) = 9539.29$ 。本书后面还会反复提到这一点。

V 因 X 而生

细细想来，本章介绍的 $Z = XV$ 的数据转换很神奇！

还是以鸢尾花数据为例，如图 56 所示，矩阵 X 的格拉姆矩阵 G 主对角线以外元素代表任意两个向量的内积。 G 中没有一个元素为 0。

但是经过数据转换 $Z = XV$ ，如图 55 所示，矩阵 Z 的格拉姆矩阵 A ，主对角线以外元素都为 0。 z_i 和 z_j 都是长度为 150 的列向量，两者的向量内积竟然为 0，也就是说 150 个成对元素乘积之和为 0！

对于鸢尾花数据矩阵 X 来说，(47) 中给出的这个 V 真可谓“无数里挑一”，！

换句话说， V 因 X 而生！

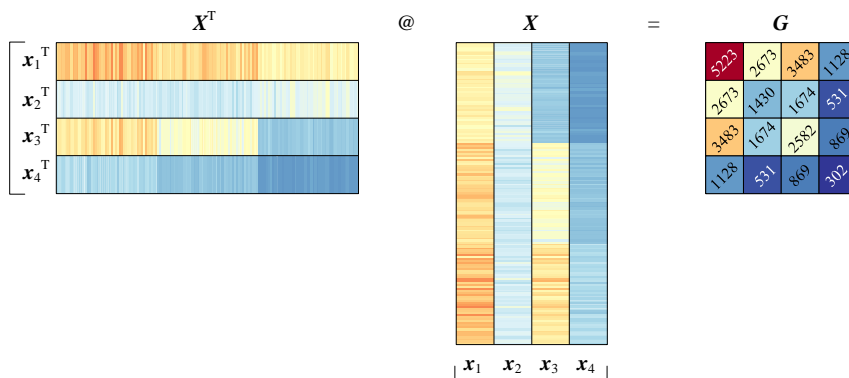


图 56. 矩阵 X 的格拉姆矩阵

对角化

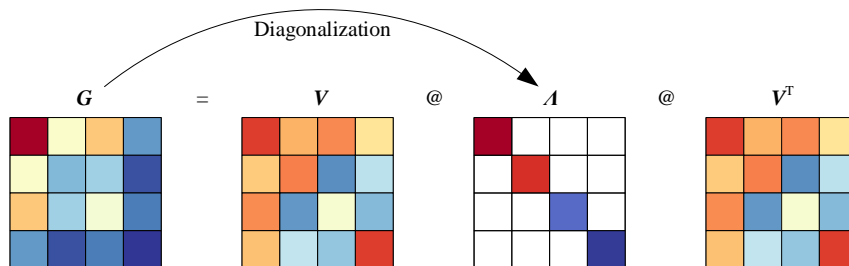
将 $Z = XV$ 代入 (54) 得到：

$$Z^T Z = (XV)^T XV = V^T \underset{G}{X^T X} V = V^T G V = A \quad (57)$$

再进一步，由于 V 为规范正交基，因此 $V^T V = I$ ，根据 (57) 等式关系， G 可以写成：

$$G = V A V^T \quad (58)$$

这就是说，如图 57 所示， X 的格拉姆矩阵 G 可以通过某种矩阵分解得到三个矩阵的乘积。其中， V 为正交矩阵， A 为对角方阵。从 G 到 A 也是一个方阵**对角化** (diagonalization) 的过程。

图 57. 对 G 矩阵分解

➔ 为了获得 (58) 等式，就需要本书下一个板块要介绍的重要线性代数工具——特征值分解 (eigen decomposition)。

回看规范正交基 V ：双标图

像 Z 这样具有这种**正交性** (orthogonality) 的数据应用场合很多，因此我们再深究一步。

类似 (48)，我们可以把 z_1 、 z_2 、 z_3 、 z_4 写成如下线性组合：

$$\begin{aligned}
 z_1 &= Xv_1 = 0.751x_1 + 0.380x_2 + 0.513x_3 + 0.168x_4 \\
 z_2 &= Xv_2 = 0.284x_1 + 0.547x_2 - 0.709x_3 - 0.344x_4 \\
 z_3 &= Xv_3 = 0.502x_1 - 0.675x_2 - 0.059x_3 - 0.537x_4 \\
 z_4 &= Xv_4 = 0.321x_1 - 0.317x_2 - 0.481x_3 + 0.752x_4
 \end{aligned}$$

$$V = \begin{bmatrix} 0.751 & 0.284 & 0.502 & 0.321 \\ 0.380 & 0.547 & -0.675 & -0.317 \\ 0.513 & -0.709 & -0.059 & -0.481 \\ 0.168 & -0.344 & -0.537 & 0.752 \end{bmatrix}$$

(59)

请大家格外注意 (59) 颜色对应关系。

我们给 z_1 、 z_2 、 z_3 、 z_4 取一个新的名字——**主成分** (Principal Component, PC)。 z_1 、 z_2 、 z_3 、 z_4 分别对应 PC_1 、 PC_2 、 PC_3 、 PC_4 。显然 PC_1 、 PC_2 、 PC_3 、 PC_4 相互垂直。

有了 PC_1 、 PC_2 、 PC_3 、 PC_4 ，我们可以绘制图 58 这幅图，图中有 6 幅子图，每幅子图都是一个**双标图** (biplot)。

我们以图 58 中阴影背景子图为例介绍如何理解双标图。

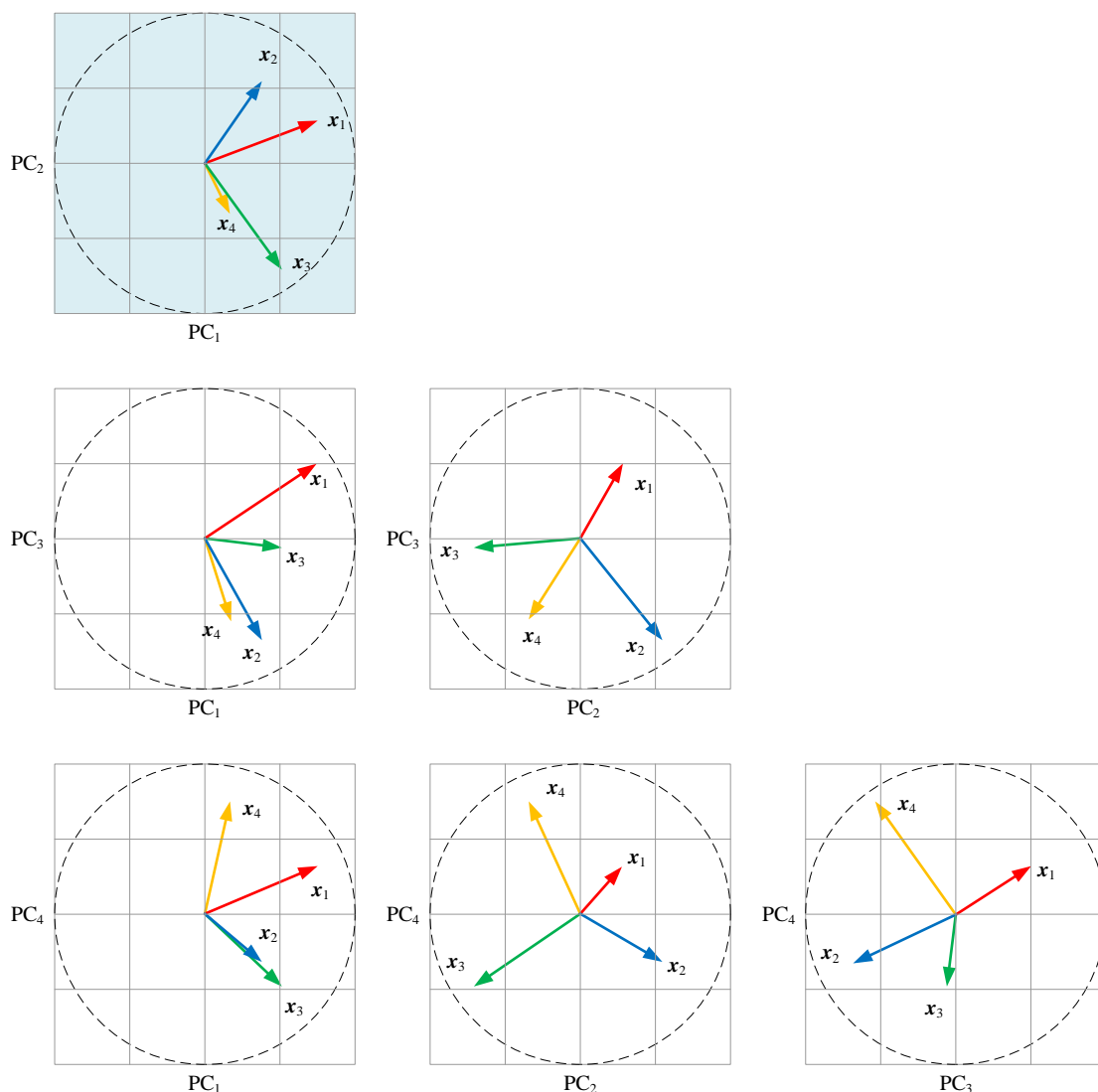


图 58. 分解主成分

在 PC_1 - PC_2 平面上, x_1 对应坐标点为 $(0.751, 0.284)$, 这意味着 x_1 分别给 z_1 和 z_2 贡献 $0.751x_1$ 和 $0.284x_1$ 。同理, 我们可以发现 x_2 分别给 z_1 和 z_2 贡献 $0.380x_2$ 和 $0.547x_2$ 。以此类推。

反向来看, x_1 在 PC_1 、 PC_2 、 PC_3 、 PC_4 方向上的分量分别为 $0.751x_1$ 、 $0.284x_1$ 、 $0.502x_1$ 、 $0.321x_1$, 这四个成分满足:

$$0.751^2 + 0.284^2 + 0.502^2 + 0.321^2 = 1 \quad (60)$$

反向正交投影

由于 $Z = XV$, X 则可以通过 Z 反推得到, 即:

$$X = ZV^{-1} = ZV^T \quad (61)$$

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 59 所示为 X 和 Z 相互转化的关系。

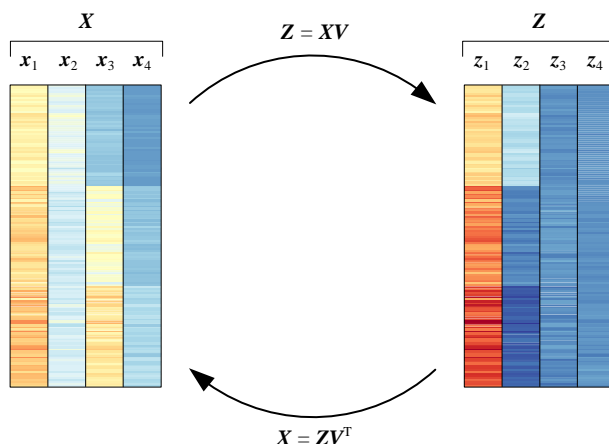


图 59. X 和 Z 之间关系

将 (61) 展开写：

$$X = ZV^T = Z \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{(1)} \\ \mathbf{v}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{v}^{(D)} \end{bmatrix}^T = Z \begin{bmatrix} \mathbf{v}^{(1)T} & \mathbf{v}^{(2)T} & \cdots & \mathbf{v}^{(D)T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z\mathbf{v}^{(1)T} & Z\mathbf{v}^{(2)T} & \cdots & Z\mathbf{v}^{(D)T} \end{bmatrix} \quad (62)$$

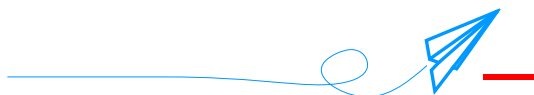
取出 (62) 矩阵 X 第 j 列对应的等式：

$$\mathbf{x}_j = Z\mathbf{v}^{(j)T} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_1 & \mathbf{z}_2 & \cdots & \mathbf{z}_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{j,1} \\ v_{j,2} \\ \vdots \\ v_{j,D} \end{bmatrix} = v_{j,1}\mathbf{z}_1 + v_{j,2}\mathbf{z}_2 + \cdots + v_{j,D}\mathbf{z}_D \quad (63)$$

$\mathbf{v}^{(j)}$ 代表 V 的第 j 行行向量，也是一个单位向量。(63) 是一个“反向”正交投影的过程。



(63) 这一视角在主成分分析中非常重要，我们将会 在《数据科学》一书中深入探讨。



本章内容是个分水岭。如果本章内容，特别是前两节内容，你读起来毫无压力，恭喜你，你可以顺利进入本书下一个板块——矩阵分解——的学习。阅读本章时，如果你感觉很吃力，请回头重读前 9 章内容。

大家可能会好奇，本章中神奇的 V 是怎么算出来的？其实本章代码文件已经给出了答案——特征值分解。这是本书下一个板块要讲的重要内容之一。

有数据的地方，就有向量！有向量的地方，就有几何！

再加一句，有向量的地方，肯定有空间！

请大家带着这三句话，进入本书下一阶段的学习。