Singular Value Decomposition

15 奇异值分解

应该是最重要的矩阵分解, 没有之一



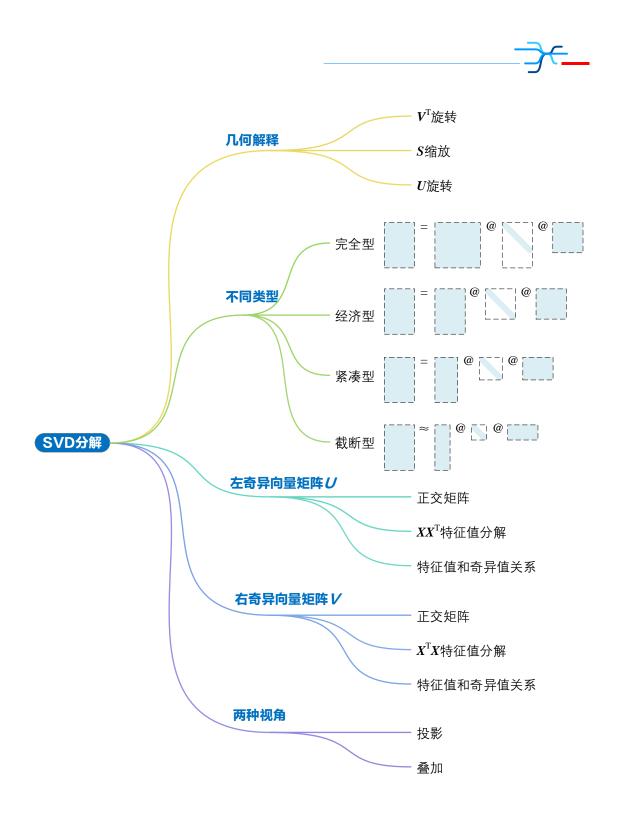
人不过是一根芦苇,世界最脆弱的生灵;但是,人是会思考的芦苇。

Man is but a reed, the most feeble thing in nature, but he is a thinking reed.

—— 布莱兹·帕斯卡 (Blaise Pascal) | 法国哲学家、科学家 | 1623 ~ 1662



- 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

15.1 几何视角: 旋转 \rightarrow 缩放 \rightarrow 旋转

本书第 11 章简要介绍过**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD),这个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。

对矩阵 $X_{n \times D}$ 奇异值分解得到:

$$\boldsymbol{X}_{mD} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

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 $s_i \ge 0$ 。

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)。

▲特别注意,(1)中矩阵 V的转置运算。

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 → 缩放 →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 $(A) \rightarrow$ 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。

为了方便解释, 我们用 2×2 矩阵 A 做例子。

矩阵 A 坐标向量 x 得到 z。对 A 奇异值分解,得到 U、S 和 V 三个矩阵:

$$\mathbf{A} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \mathbf{U} \mathbf{S} \mathbf{V}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{bmatrix}$$
 (2)

图 1 所示为几何角度解释奇异值分解,A 乘 $[x_1,x_2]^T$,相当于先用 V^T 旋转,再用 S 缩放,最后用 U 旋转。

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

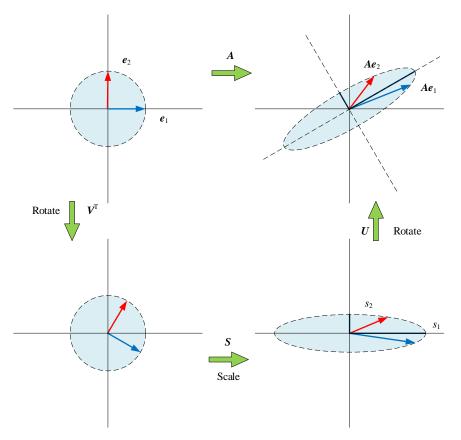


图 1. 几何角度解释奇异值分解

举个实例

下面用具体实例解释图1。

给定 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:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^{\mathrm{T}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}}_{V} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}}_{S} \underbrace{\begin{bmatrix} 0.866 & -0.5 \\ 0.5 & 0.866 \end{bmatrix}}_{V^{\mathrm{T}}}$$
(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相同,都是可对角矩阵,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。

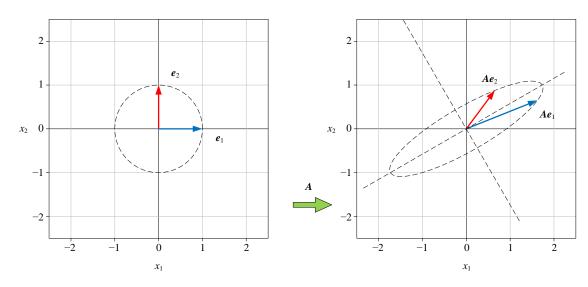


图 2. e_1 和 e_2 经过 A 线性转换

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:

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

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

$$SV^{\mathsf{T}}\boldsymbol{e}_{1} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.866 \\ -0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.732 \\ -0.25 \end{bmatrix}$$

$$SV^{\mathsf{T}}\boldsymbol{e}_{2} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.866 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.433 \end{bmatrix}$$
(9)

在之前"旋转"和"缩放"两步基础上,最后再利用 U 进行旋转,得到:

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

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

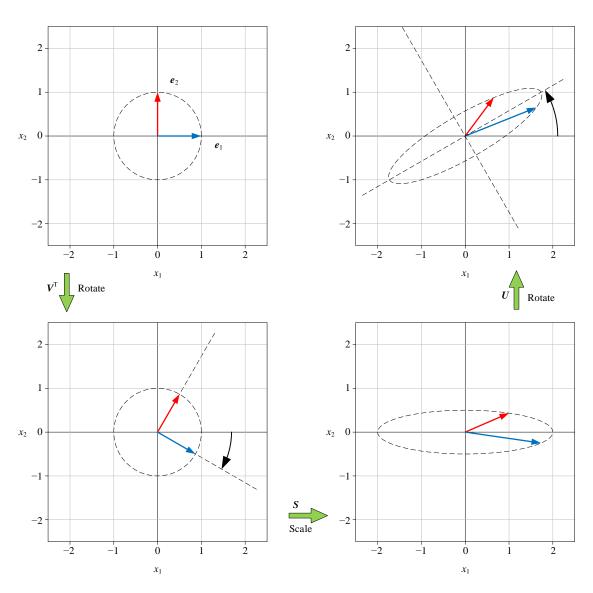


图 3. e_1 和 e_2 分别经过 V^T 、S和 U 转换

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 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)。

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:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_1 & & & & \\ & s_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_D \end{bmatrix}$$
 (11)

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

如图 4 所示,S 可以分块为上下两个子块——方阵对角矩阵和全 0 矩阵 O 。右奇异值矩阵 V 形状为 $D \times D$ 。

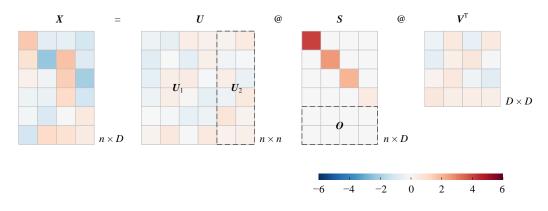


图 4. 矩阵 X 的完全型 SVD 分解

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,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 就是细高长方形,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:

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

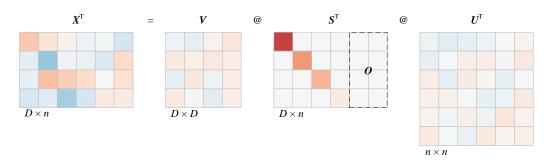


图 5. 矩阵 X^T 的完全型 SVD 分解

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。

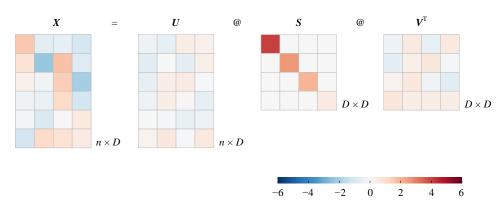


图 6. 经济型 SVD 分解

在经济型 SVD 分解中,S 为对角方阵:

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

当S为对角方阵时, (12)可以写成:

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



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:

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

图7所示为运算热图。

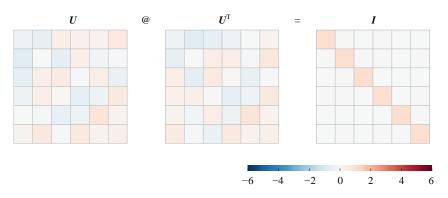


图 7. U 和自己转置 U^{T} 的乘积为单位矩阵

特征值分解

图 8 所示为 X 和自己转置 X^{T} 相乘得到 Gram 矩阵 XX^{T} 的热图, XX^{T} 为 $n \times n$ 方阵。

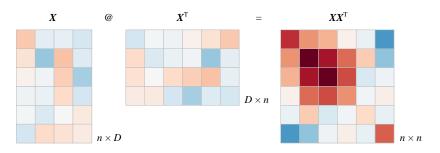


图 8.X 和自己转置 X^T 的乘积热图

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

对方阵 XX^T 进行特征值分解,可以发现 U 是特征向量,而 SS^T 是特征值矩阵:

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

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

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

图 9 所示为 X^TX 特征值分解热图。

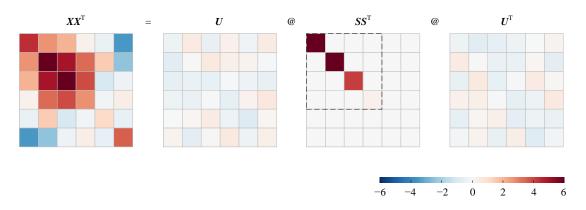


图 9. 对 XTX 特征值分解

 SS^{T} 主对角线为特征值,对 SS^{T} 展开得到:

$$SS^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} s_{1} & & & & \\ & s_{2} & & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & s_{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{1} & & & & \\ & s_{2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_{D} & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{1}^{2} & & & & \\ & s_{2}^{2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & s_{D}^{2} & & \\ & & & & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_{1} & & & & \\ & \lambda_{2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_{D} & & \\ & & & & \lambda_{n} \end{bmatrix}$$
(17)

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

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

特别地,在经济型 SVD 分解中,S 为对角方阵;因此 XX^T 特征值分解可以写作:

$$XX^{\mathrm{T}} = US^{2}U^{\mathrm{T}} \tag{19}$$

向量空间

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 XX^{T} 是对称矩阵,形状为 $n \times n$,可以进行特征值分解。

如图 10 所示, XX^{T} 进行特征值分解得到正交矩阵 $U = [u_1, u_2, ..., u_n]$ 。前文提到,U 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

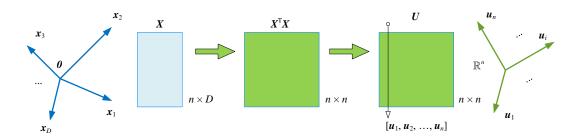


图 10. 对 Gram 矩阵 XX^T 特征值分解得到规范正交基 U

类比 QR 分解

对于数据矩阵 X 进行 QR 分解得到:

$$X = QR \tag{20}$$

对于完全型 QR 分解,Q 为正交矩阵,即一个规范正交基 $[q_1, q_2, ..., q_D]$ 。

对 X 进行完全型 SVD 分解。把结果写成:

$$X = U(SV^{\mathsf{T}}) \tag{21}$$

对比 (20) 和 (21),Q 和 U 都是正交矩阵,形状相同;但是,两者显然不同。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。对比 (20) 和 (21),R 则对应 SV^T 。特别地, SV^T 结果正交,即 $SV^T(SV^T)^T = SV^TVS = S^2$ 。





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 u

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

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I} \tag{22}$$

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

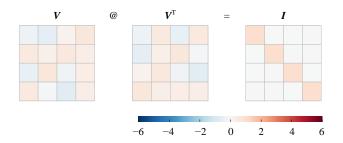


图 11.V 和其转置 V^{T} 的乘积也是单位矩阵

特征值分解

图 12 所示为转置 X^T 和 X 相乘得到 X^TX 的热图, X^TX 为 $D \times D$ 方阵。

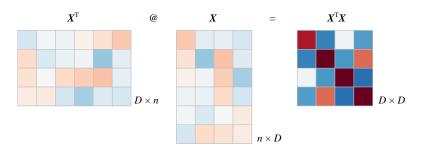


图 12. 转置 X^T 和 X 乘积热图

对 XTX 特征值分解得到:

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

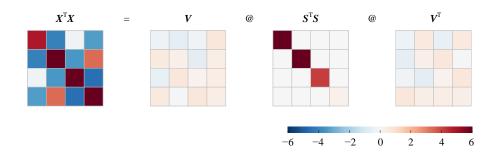
$$= VS^{\mathsf{T}}(U^{\mathsf{T}}U)SV^{\mathsf{T}}$$

$$= VS^{\mathsf{T}}SV^{\mathsf{T}}$$
(23)

 $V \in X^TX$ 的特征向量, 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。

特别地,在经济型 SVD 分解中,S 为对角方阵;因此 X^TX 特征值分解可以写成:

$$X^{\mathsf{T}}X = VS^{2}V^{\mathsf{T}} \tag{24}$$



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

图 13. 对 XTX 进行特征值分解

前文提过, 经济型 SVD 分解中, S 为对角方阵, S 主对角元素 s_i 为奇异值:

$$S = \begin{bmatrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & s_D \end{bmatrix}$$
 (25)

对 X^TX 进行特征值分解, S^2 为特征值矩阵:

$$S^{2} = \begin{bmatrix} s_{1}^{2} & & & \\ & s_{2}^{2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_{D}^{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_{1} & & & \\ & \lambda_{2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_{D} \end{bmatrix}$$

$$(26)$$

(25) 和 (26) 奇异值和特征值之间的关系如图 14 所示。

→ 本书第 24 章将总结分解不同对象时, 奇异值分解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 $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$,它也是个规范正交基,张起的空间为 \mathbb{R}^D 。

通过本节比较,我们发现奇异值分解强大之处在于,它可以分解一切实数矩阵,而且一次性获得 $U = [u_1, u_2, ..., u_n]$ 和 $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$ 两个规范正交基。

⇒大家可能好奇, *U和 V* 这两个规范正交基有怎么样的联系和应用? 这个问题留给本书最后三章回答。

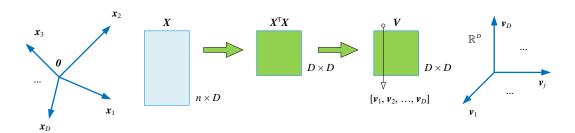


图 15. 对 Gram 矩阵 X^TX 特征值分解得到规范正交基 V

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 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

本节用两个数据视角观察 SVD 分解。

投影

将(1)等式左右两侧右乘V,可以得到:

$$X_{n \times D}V = US \tag{27}$$

将 V和 U 本身分别写成左右排列的列向量:

(28) 进一步展开得到:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}\mathbf{v}_1 & \mathbf{X}\mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{X}\mathbf{v}_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1\mathbf{u}_1 & s_2\mathbf{u}_2 & \cdots & s_D\mathbf{u}_D \end{bmatrix}$$
(29)

因此,

$$Xv_{i} = s_{i}u_{i} \tag{30}$$

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

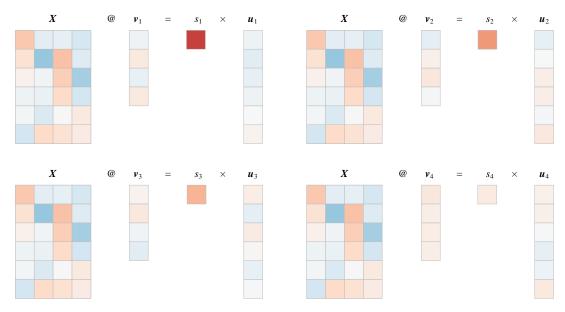


图 16. X 向 v_j 映射结果为 $s_j u_j$

(30) 左右都是向量,等式两侧求模,即 L^2 范数,得到:

$$\|\mathbf{X}\mathbf{v}_i\| = \|\mathbf{s}_i\mathbf{u}_i\| = \mathbf{s}_i \tag{31}$$

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:

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

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

$$(32)$$

举个例子,对于D=4时:

$$X = s_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}} + s_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + s_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + s_4 u_4 v_4^{\mathrm{T}}$$
(33)

(33) 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, $s_j u_j v_j^T$ 的秩为 1。

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

如图 17 所示,可以发现对应 (33) 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深浅变化。下一章会深入介绍通过叠加换换原始数据矩阵。

此外,相信大家看到这里早已发现,本节前两个视角实际上就是矩阵乘法的两个视角。

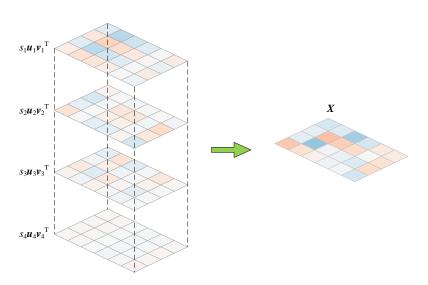


图 17. 四幅热图叠加还原原始图像

张量积

再进一步, 利用 (30) 给出的关系, 我们将 (33) 写成张量积之和的形式

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

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

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

$$= X\left(v_{1}\otimes v_{1} + v_{2}\otimes v_{2} + v_{3}\otimes v_{3} + v_{4}\otimes v_{4}\right)$$
(34)

这就是本书之前讲解的思路——数据在不同向量方向上"二次投影"再"层层叠加"。

能完成类似 (34) 投影的规范正交基有无数组,为什么 $V = [\nu_1, \nu_2, ..., \nu_D]$ 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 章要回答的问题。



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

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



下图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。

Gram 矩阵是奇异值分解和特征值分解的桥梁,这一点本书后面还要提到。

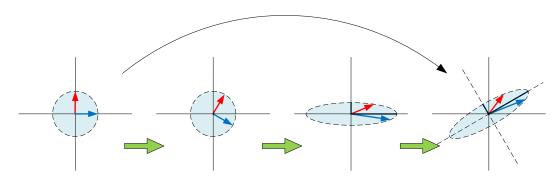


图 18. 总结本章重要内容的四副图

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