| | |
|---|---|
| 作者 | **生姜 DrGinger** |
| 脚本 | **生姜 DrGinger** |
| 视频 | **崔崔 CuiCui** |
| 开源学习资源 | https://github.com/Visualize-ML |
| 平台 | https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang<br>https://space.bilibili.com/3546865719052873<br>https://space.bilibili.com/513194466 |


# 11.4 格拉姆矩阵

**本节你将掌握的核心技能：**

- ▶ 格拉姆矩阵为对称矩阵，半正定、正定。
- ▶ 格拉姆矩阵和原矩阵列向量内积关系。
- ▶ 主对角线元素为列向量 L2 范数的平方。
- ▶ 格拉姆矩阵的谱分解。
- ▶ 通过正交矩阵，完成原矩阵的正交化。
- ▶ 根据特征值大小判断特征向量的“解释力”，理解主次之分。
- ▶ 格拉姆矩阵的谱分解和奇异值分解的关系。

在整个线性代数和数据科学的世界里，有一个看似简单却无比核心的角色，那就是格拉姆矩阵 (Gram matrix)。本书前文提过格拉姆矩阵是一类特殊的对称矩阵。

别看格拉姆矩阵的定义朴素，它的影响却无处不在。从内积、向量范数、谱分解到奇异值分解，从正定性到 Cholesky 分解、LDL 分解，再到数据分析中常见的数据矩阵、协方差矩阵、相关性系数矩阵，甚至机器学习算法中的核方法 (比如高斯核支持向量机、核主成分分析)——都在某种形式上与格拉姆矩阵息息相关。

鉴于格拉姆矩阵的重要性，我们专门拿出一节聊聊格拉姆矩阵。

## 定义

给定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形状为 $m \times p$，即 $\boldsymbol{A}$ 有 $m$ 行、$p$ 列，$\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵为

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} \tag{1}$$

如图 1 所示，$\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵形状为 $p \times p$。

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

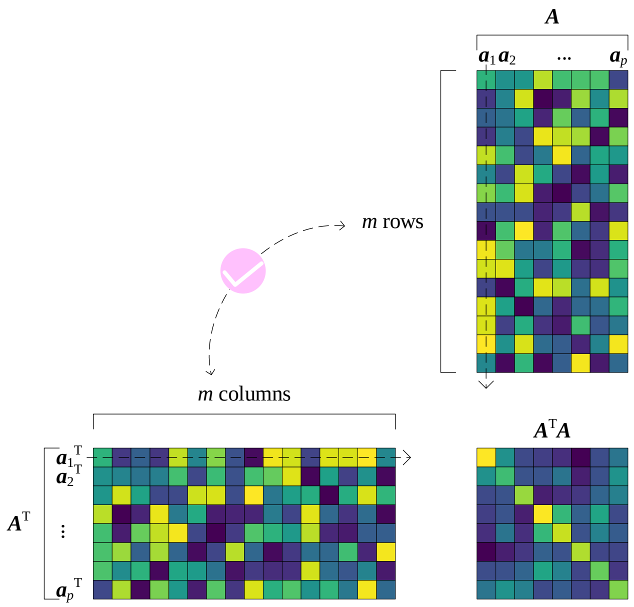



图 1． 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$

显然，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为对称矩阵

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}} = \left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\right)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{G} \tag{2}$$

此外，格拉姆矩阵式半正定矩阵 (positive semidefinite)，即对于任意 $p$ 维非零列向量 $\boldsymbol{x}$，都有

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right) = \left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right\|^2 \ge 0 \tag{3}$$

本书后文会专门讲解正定性。

格拉姆矩阵的行列式 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 为零时，当且仅当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量线性相关。

$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的秩等于 $\boldsymbol{A}$ 的列秩。可以这样理解，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 只是对原始列向量之间的内积关系做了“压缩整理”，但不会增加或减少信息维度。

用矩阵乘法第一视角展开 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 大家就会看到内积。

## 矩阵乘法第一视角

用矩阵乘法第一视角展开 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_p^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_p \\ \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{a}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_p \end{bmatrix} \tag{4}$$

上式也可以写成向量内积形式

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

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_p\\ \boldsymbol{a}_2\cdot\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2\cdot\boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_2\cdot\boldsymbol{a}_p\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{a}_p\cdot\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_p\cdot\boldsymbol{a}_2 & \cdots & \boldsymbol{a}_p\cdot\boldsymbol{a}_p\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\langle\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_1\rangle & \langle\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_p\rangle\\ \langle\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_1\rangle & \langle\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_p\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\boldsymbol{a}_p,\boldsymbol{a}_1\rangle & \langle\boldsymbol{a}_p,\boldsymbol{a}_2\rangle & \cdots & \langle\boldsymbol{a}_p,\boldsymbol{a}_p\rangle\end{bmatrix} \tag{5}$$

如图 2 所示，格拉姆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的主对角线元素为 $\boldsymbol{A}$ 列向量和自身内积，也可以写成 $L^2$ 范数平方，即

$$\boldsymbol{a}_j^{\mathrm{T}}@\boldsymbol{a}_j=\boldsymbol{a}_j\cdot\boldsymbol{a}_j=\left\|\boldsymbol{a}_j\right\|^2 \tag{6}$$

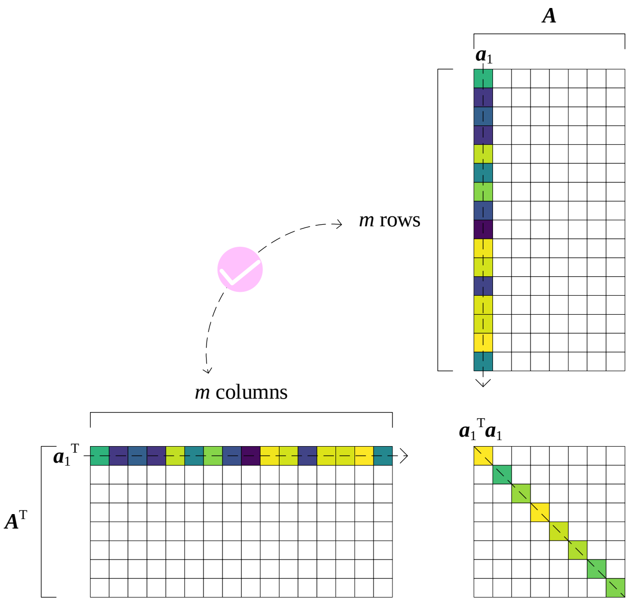



图 2. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的格拉姆矩阵的对角线元素

如图 3 所示，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的非主对角线元素为 $\boldsymbol{A}$ 两两列向量内积。比如，

$$\boldsymbol{a}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_3 \tag{7}$$

从内积角度来看上式，

$$\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_3\cdot\boldsymbol{a}_1 \tag{8}$$

这也印证了 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵。

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

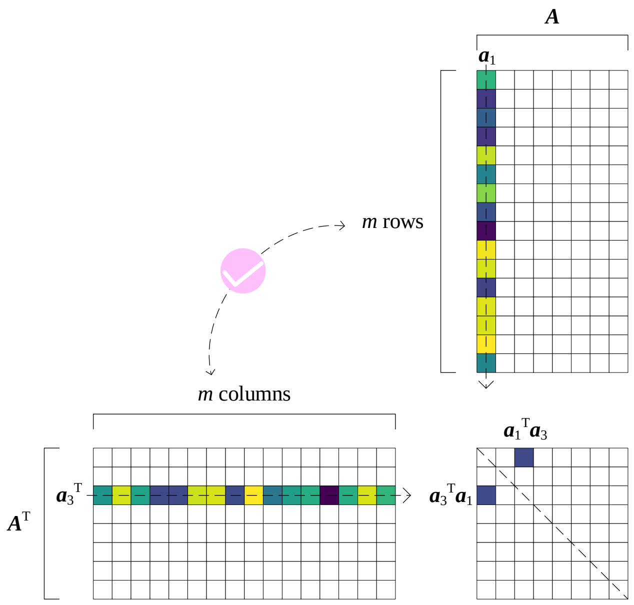



图 3．矩阵 $A$ 的格拉姆矩阵的非对角线元素

## 第二个格拉姆矩阵

值得注意的是，如图 4 所示，$AA^T$ 也是一个格拉姆矩阵。$AA^T$ 的主对角线为 $A$ 行向量和自身的内积 ($L^2$ 范数平方)；$AA^T$ 的非主对角线元素为 $A$ 两两行向量内积。显然，$AA^T$ 也是对称矩阵。

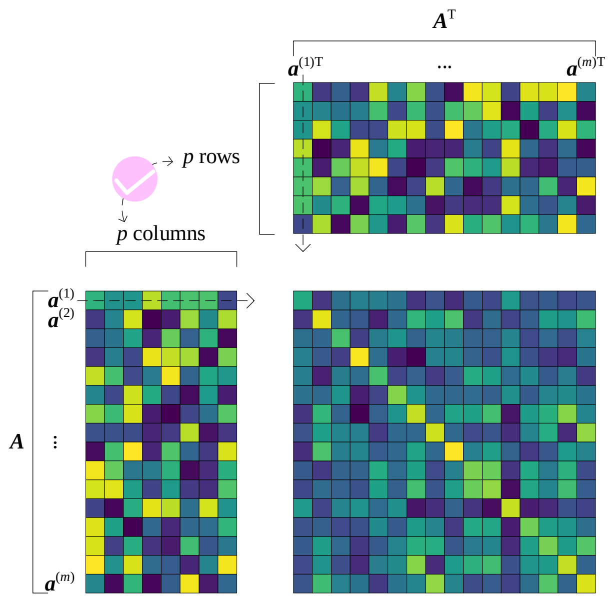



图 4．矩阵 $A^T$ 的格拉姆矩阵 $AA^T$

## 谱分解格拉姆矩阵

如图 5 所示，对 $G = A^TA$ 进行谱分解得到

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

$$G = V\Lambda V^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

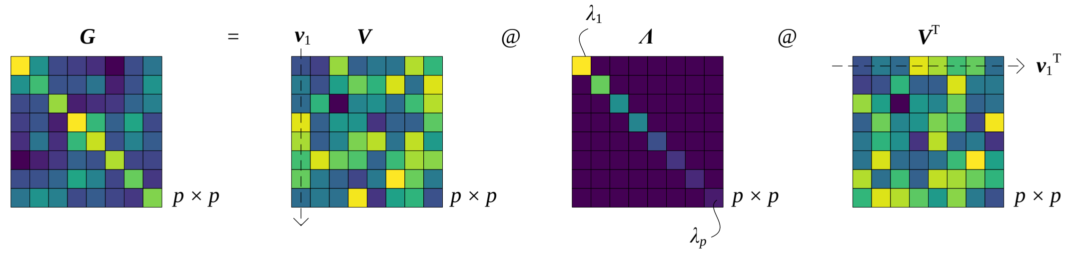



图 5．对格拉姆矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 谱分解

## 对角化

如图 6 所示，$G$ 对角化得到

$$V^{\mathrm{T}}GV = \Lambda \tag{10}$$

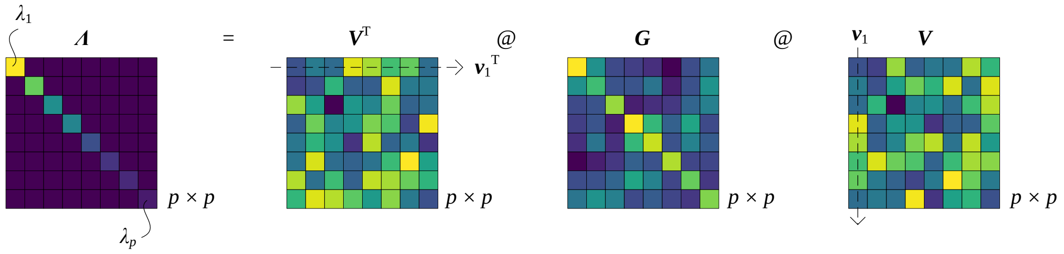



图 6．格拉姆矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 对角化

把 $V$ 写成 $[v_1, v_2, \ldots, v_p]$，(10) 展开写成

$$\underbrace{\begin{bmatrix} v_1^{\mathrm{T}}Gv_1 & v_1^{\mathrm{T}}Gv_2 & \cdots & v_1^{\mathrm{T}}Gv_p \\ v_2^{\mathrm{T}}Gv_1 & v_2^{\mathrm{T}}Gv_2 & \cdots & v_2^{\mathrm{T}}Gv_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_p^{\mathrm{T}}Gv_1 & v_p^{\mathrm{T}}Gv_2 & \cdots & v_p^{\mathrm{T}}Gv_p \end{bmatrix}}_{V^{\mathrm{T}}GV} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p \end{bmatrix}}_{\Lambda} \tag{11}$$

图 7 所示为计算对角方阵 $\Lambda$ 主对角线元素示例。

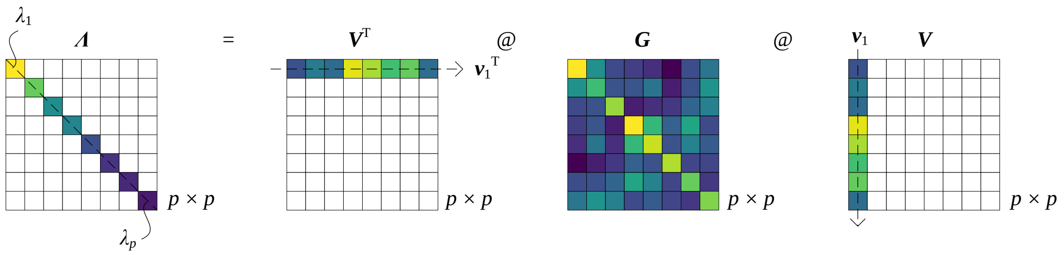



图 7．对角方阵 $\Lambda$ 主对角线元素

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 所示为计算对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 非主对角线元素示例。

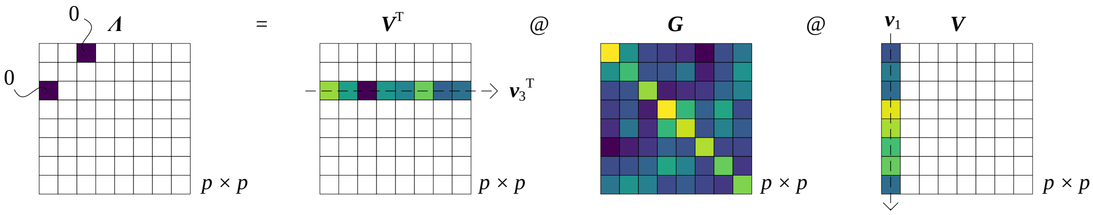



图 8．对角方阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 非主对角线元素

把 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 带入上式并展开得到

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{12}$$

整理上式得到

$$\underbrace{\begin{bmatrix} (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1) & (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2) & \cdots & (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p) \\ (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1) & (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2) & \cdots & (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1) & (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2) & \cdots & (\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p) \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{V}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{13}$$

## 投影

令 $\boldsymbol{b}_j = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j\ (j = 1, \ldots, p)$，上式可以写成

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_p \\ \boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{b}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_p^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_p \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \tag{14}$$

如图 9 所示，由于 $\boldsymbol{v}_j$ 是单位列向量，矩阵乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j$ 相当于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向 $\mathrm{span}(\boldsymbol{v}_j)$ 投影结果为 $\boldsymbol{b}_j$。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的每个行向量相当于数据点。

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

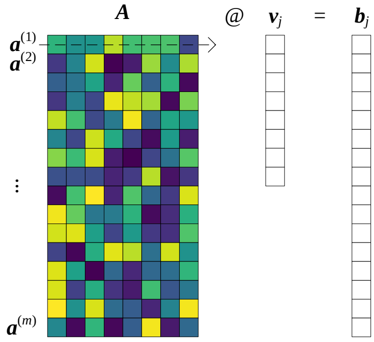



图 9. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影结果为 $\boldsymbol{b}_j$

比如，图 10 所示为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向 span($\boldsymbol{v}_1$) 投影结果为 $\boldsymbol{b}_1$。

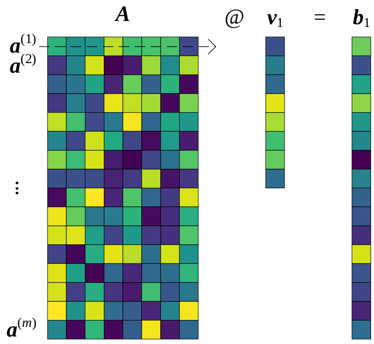



图 10. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向 span($\boldsymbol{v}_1$) 投影结果为 $\boldsymbol{b}_1$

## 正交化

图 11 所示为矩阵乘法 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{AV}$。几何角度来看，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向 span($\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_p$) 投影结果为 $\boldsymbol{B}$。

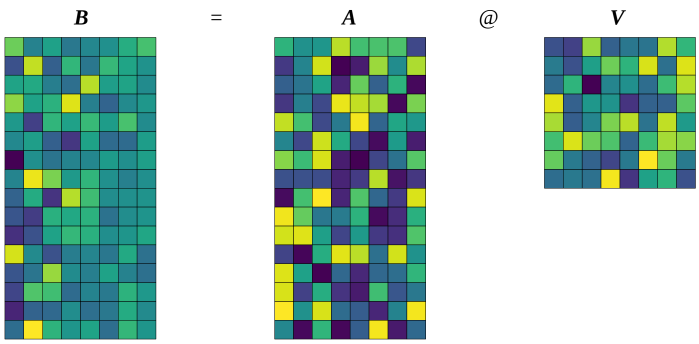



图 11. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向 span($\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_p$) 投影结果为 $\boldsymbol{B}$

将 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{AV}$ 带入(14)，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

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p \end{bmatrix}}_{\Lambda} \tag{15}$$

如图 12 所示，上式相当于 $\boldsymbol{B}$ 的格拉姆矩阵。

大家是否发现，$\boldsymbol{B}$ 的列向量两两正交？！

也就是说，$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}$ 相当于完成了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的正交化。

本书前文介绍的 QR 分解也是正交化，请大家回顾。

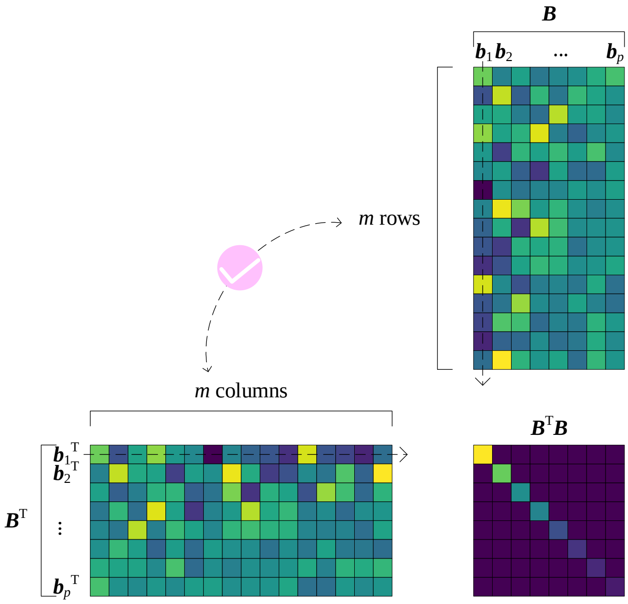



图 12. 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$

如图 13 所示，(14) 对角线元素显然可以写成 $L^2$ 范数的平方：

$$\left\|\boldsymbol{b}_j\right\|_2^2 = \left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j\right\|_2^2 = \lambda_j \tag{16}$$

注意，看到矩阵乘积结果为标量时，一定要想一想矩阵乘积能否写成 $L^2$ 范数。

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

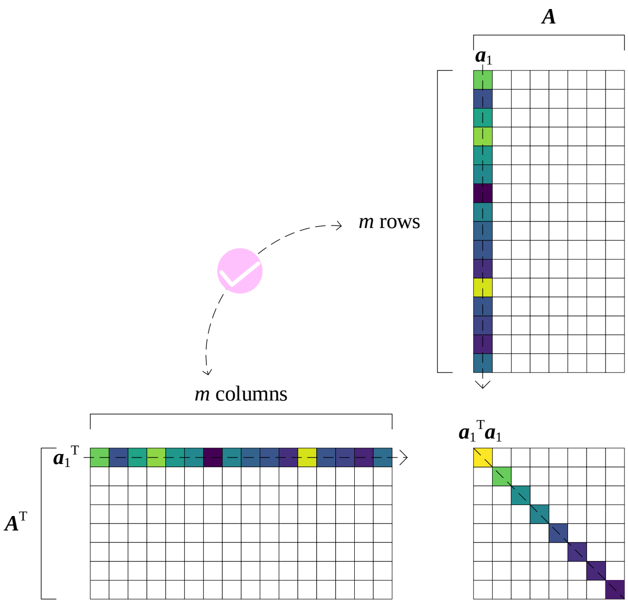



图 13．矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的格拉姆矩阵的对角线元素

如图 14 所示，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的格拉姆矩阵的非对角线元素为 0。

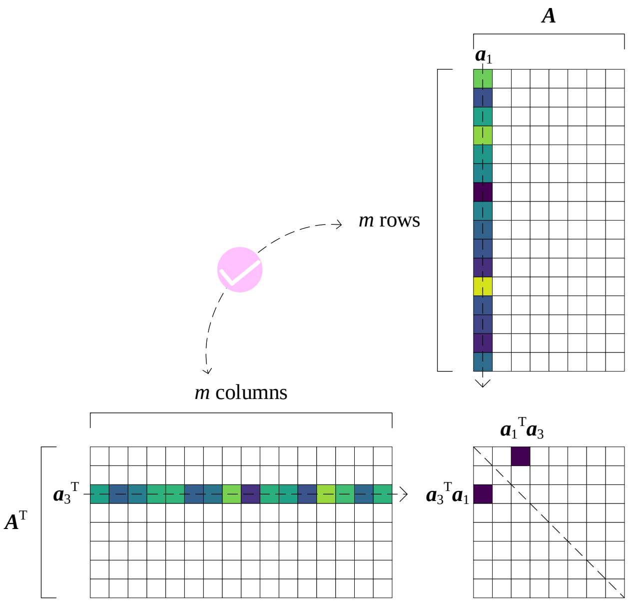



图 14．矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的格拉姆矩阵的非对角线元素

## 几何视角

该怎么理解 (16)？

我们还是要拿出看家本领——几何视角。

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 15 所示，$\boldsymbol{A}$ 的每个行向量为一个散点 ●。这些散点 ● 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 投影结果为 $\boldsymbol{b}_j$，即图中 ×。$\boldsymbol{b}_j$ 中的每个值就是 × 到原点的距离。

图 15 中红点 ● 代表矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 $i$ 行行向量为 $\boldsymbol{a}^{(i)}$。$\boldsymbol{a}^{(i)}$ 向 $\boldsymbol{v}_j$ 投影结果 $b_j^{(i)}$ 就是 $\boldsymbol{a}^{(i)}$ 在 span($\boldsymbol{v}_j$) 的坐标：

$$b_j^{(i)} = \boldsymbol{a}^{(i)}\boldsymbol{v}_j \tag{17}$$

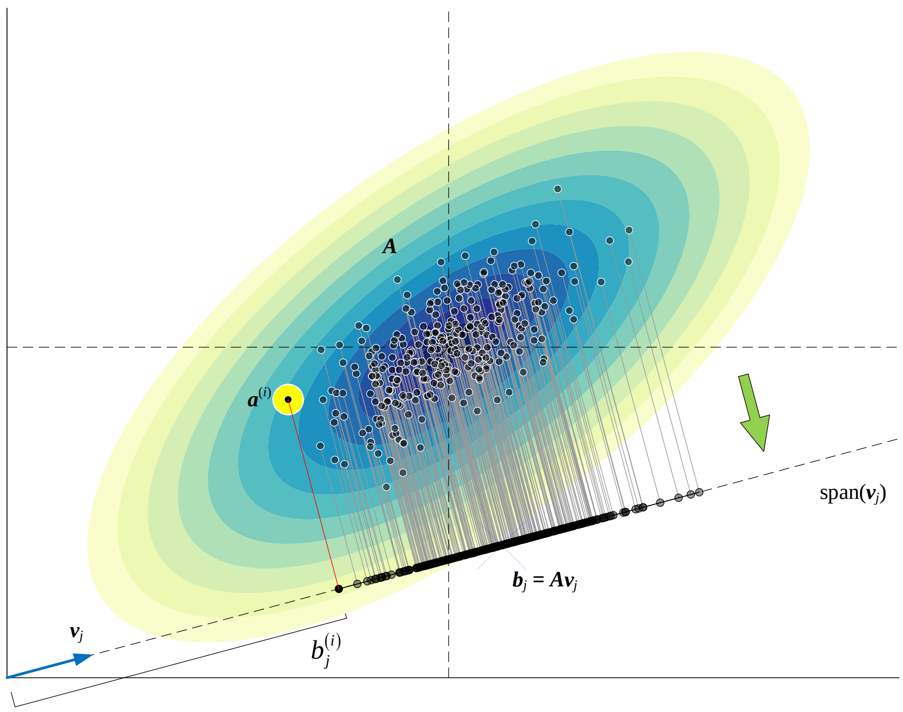



图 15. $\boldsymbol{A}$ 向 span($\boldsymbol{v}_j$) 正交投影结果为 $\boldsymbol{b}_j$，几何视角

图 15 中椭圆实际上是另外一种距离度量——马氏距离。这是本书后续要讲解的话题。

有了这个视角，我们知道 (16) 中 $\left\|\boldsymbol{b}_j\right\|_2^2$ 代表 $b_j^{(i)}$ 到原点距离 (有正负) 的平方和，即：

$$\left\|\boldsymbol{b}_j\right\|_2^2 = \left(b_j^{(1)}\right)^2 + \left(b_j^{(2)}\right)^2 + \cdots \left(b_j^{(n)}\right)^2 = \lambda_j \tag{18}$$

这些距离的平方和恰好等于特征值 $\lambda_j$。

若 (14) 中特征值 $\lambda_j$ 按大小排列，即 $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \lambda_D$。这说明特征向量 $\boldsymbol{v}_j$ 也有主次之分。

这图 16 所示，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 朝不同特征向量 $\boldsymbol{v}$ 投影，得到的 $\left\|\boldsymbol{b}\right\|_2^2 = \left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}\right\|_2^2$ 有大有小，大小就对应特征值。这也意味着特征向量也有主次重要性之分。在 $\mathbb{R}^D$ 有无数个 $\boldsymbol{v}$ 中，$\boldsymbol{A}$ 朝第一特征向量 $\boldsymbol{v}_1$ 投影对应的 $\left\|\boldsymbol{b}_1\right\|_2^2 = \left\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1\right\|_2^2$ 最大，最大值为 $\lambda_1$。

这便是下一节主成分分析的核心思路。

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

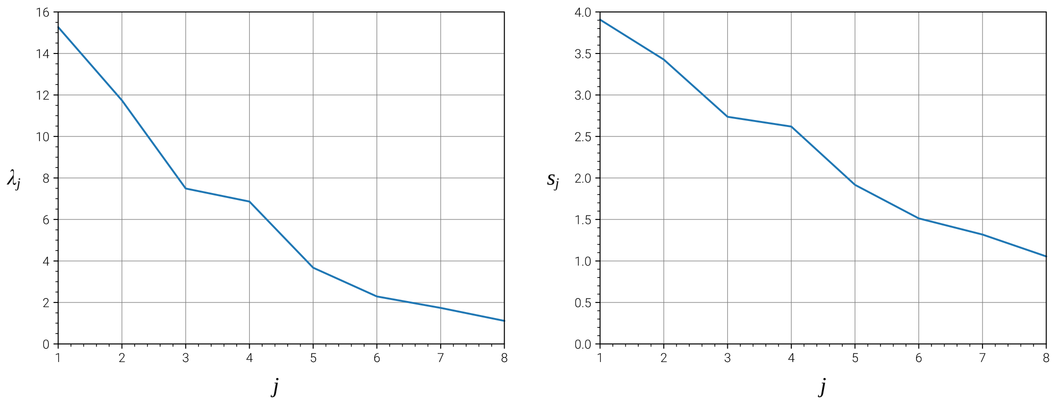



图 16. $s_j$ (特征值平方根) 决定了特征向量的“解释力”大小

## 单位化

(18) 开方得到

$$\left\|\boldsymbol{b}_j\right\| = \sqrt{\left(b_j^{(1)}\right)^2 + \left(b_j^{(2)}\right)^2 + \cdots \left(b_j^{(n)}\right)^2} = \sqrt{\lambda_j} \tag{19}$$

令 $\left\|\boldsymbol{b}_j\right\| = \sqrt{\lambda_j} = s_j$，上式可以写成

$$\left\|\boldsymbol{b}_j\right\| = s_j \tag{20}$$

如果特征值大于 0，我们可以对 $\boldsymbol{b}_j$ 单位化

$$\boldsymbol{u}_j = \frac{\boldsymbol{b}_j}{s_j} \tag{21}$$

也就是说

$$\boldsymbol{b}_j = s_j \boldsymbol{u}_j \tag{22}$$

把 (22) 带入 $\boldsymbol{b}_j = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j$ 得到

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = s_j \boldsymbol{u}_j \tag{23}$$

## 层层叠加

由于 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以写成

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\underbrace{\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}_{\boldsymbol{I}} &= \boldsymbol{A}\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_p \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \\
&= \boldsymbol{A}\underbrace{\left(\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{v}_p\boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}}\right)}_{\boldsymbol{I}} \\
&= \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p\boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{24}$$

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

上式中的 $\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^{\mathrm{T}}$ 都是投影矩阵！

将 (23) 带入 (24)，整理

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A} &= s_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + s_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + s_p\boldsymbol{u}_p\boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}} \\ &= \sqrt{\lambda_1}\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + \sqrt{\lambda_2}\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \sqrt{\lambda_p}\boldsymbol{u}_p\boldsymbol{v}_p^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{25}$$

也就是说我们把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成了若干形状相同矩阵的层层叠加，而 $s_j$ (特征值平方根) 决定了特征向量的“解释力”大小，具体如图 16 所示。

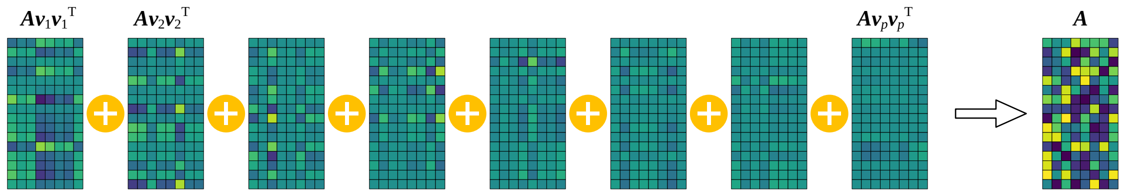



图 17. 层层叠加

## 一个全新的矩阵分解

当 $j$ 取 $1 \sim p$ 整数值，(23) 对应一系列矩阵乘法

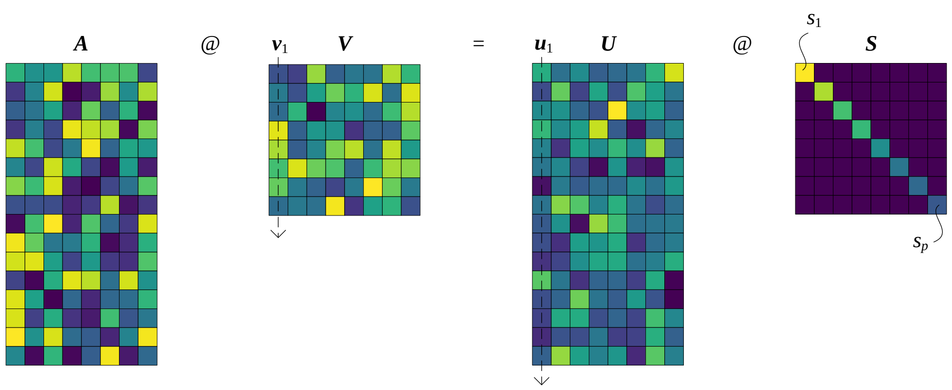
$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_1 &= s_1\boldsymbol{u}_1 \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 &= s_2\boldsymbol{u}_2 \\ &\vdots \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_p &= s_p\boldsymbol{u}_p\end{aligned} \tag{26}$$

把这一系列乘法写成

$$\boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_p\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{u}_p\end{bmatrix}\begin{bmatrix}s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_p\end{bmatrix} \tag{27}$$

即

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S} \tag{28}$$




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 18. $\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{US}$

由于 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，$\boldsymbol{V}$ 的逆等于其转置，(28) 可以写成

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{29}$$

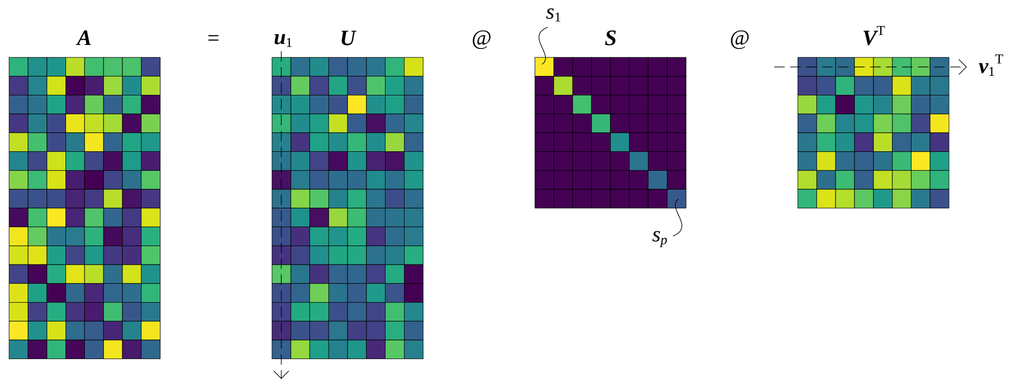



图 19. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD 分解

这实际上引出了本书后文要讲解的奇异值分解，如图 19 所示。$\boldsymbol{S}$ 的主对角线元素就是奇异值。大家很快就会发现，矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的列向量也均为单位向量，且两两正交！

请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

**Q1.** 请计算如下矩阵的格拉姆矩阵

- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

- $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$

**Q2.** 对 **Q1** 中格拉姆矩阵谱分解。

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