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 https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

13.3 瑞利商



本节你将掌握的核心技能:

- ▶ 瑞利商: 分子、分母都是二次型。
- ▶ 瑞利商最大值和最小值分别对应矩阵最大、最小特征值。
- ▶ 极坐标理解二维瑞利商。
- ▶ 单位圆观察瑞利商变化。
- ▶ 在单位球上观察三维向量对应的瑞利商值。
- ▶ 利用球面经纬度图直观理解三元瑞利商。

瑞利商是二次型的自然扩展,它本质上是一个将向量与对称矩阵之间的关系用标量形式表达出来的工具,尤其在线性代数和优化问题中应用广泛。

为了深入理解瑞利商的结构与含义,我们先从最简单二元瑞利商出发。通过极坐标系和三角函数的辅助,我们可以更清楚地观察瑞利商在二维单位圆上的变化。随后,我们将视角升维,扩展到三维空间,借助球坐标来探索三元向量下瑞利商的几何意义。

本节内容将不断贯穿和串联多个熟悉的知识点,包括极坐标、三角函数、球坐标系统、二次型结构、特征值分解与正交变换等,帮助大家在不同维度中建立起对瑞利商的深刻理解,并把不同知识板块连成网络。

定义

给定实数对称矩阵A. 它的瑞利商定义为:

$$R(x) = \frac{x^{\mathrm{T}} A x}{x^{\mathrm{T}} x} \tag{1}$$

其中, x 为自变量列向量, 即[$x_1, x_2, ..., x_D$]^T。

⚠ 注意, (1) 的分子、分母中, x^{T} 、x 千万不能约去!

由于上式分母不能为 0, 因此 x 不能为零向量 θ ; 也就是说, $x_1, x_2, ..., x_D$ 不能同时为 0。

如图 1 (a) 所示,瑞利商的分子 $x^{T}Ax$ 是矩阵 A 关于列向量 x 的二次型。

如图 1 (b) 所示,分母 x^Tx 本质上也是一个二次型,即 x^TIx 。 x^Tx 也相当于向量 x 的 L^2 范数平方, $\|x\|_{x}^{2}$,简作 $\|x\|^{2}$ 。

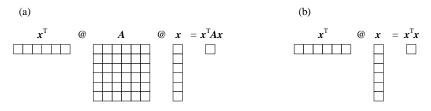


图 1. 瑞利商分子、分母的矩阵运算

▲注意,1×1矩阵只有一个元素,表现为一个单一数值。因此,它在数学上等同于标量,瑞利商的分 子、分母才都视作标量,于是才能算分数。

最大值、最小值

先给出结论、瑞利商 R(x) 的取值范围:

$$\lambda_{\min} \le R(x) \le \lambda_{\max} \tag{2}$$

其中、 λ_{\min} 、 λ_{\max} 分别为矩阵 A 的最小、最大特征值。

不难发现,瑞利商本质上来说就是一个多元函数。为了方便讨论,让我们先看一个二元瑞利商的例 子。

赵为了更好理解函数最大值、最小值的计算,我们需要用到优化方法相关的知识,这是"数学不难" 《高等数学不难》要展开讲解的话题。

二元瑞利商: 二元函数

给定如下条件

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{3}$$

我们可以得到瑞利商对应的二元函数

$$R(x_1, x_2) = \frac{2x_1^2 + 2x_2^2 + 2x_1x_2}{x_1^2 + x_2^2}.$$
 (4)

由于分母不为 0, 这个二元函数的定义域不包含原点 (0, 0)。简单来说, 函数的定义域是使函数有意义的自变量取值集合。

对于这个二元函数,我们很容易可视化它的形状。图 2 所示为这个二元瑞利商的曲面和平面填充等高线图。图像上,我们已经能够看到函数的最大(极大)、最小(极小)值。

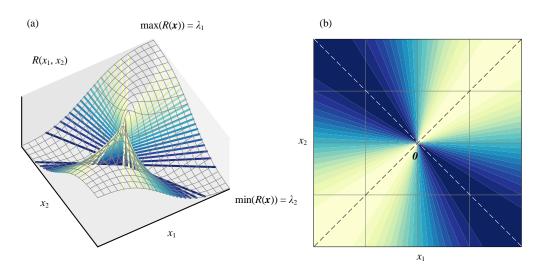
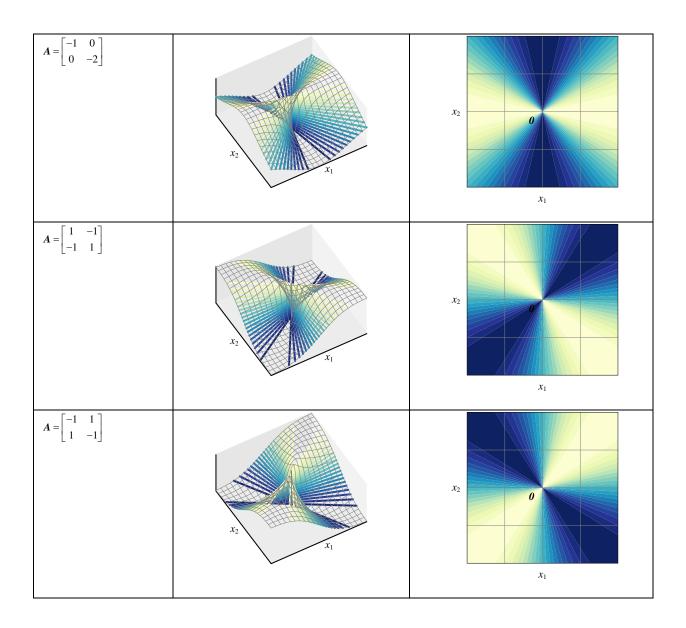


图 2. 二元瑞利商 R(x) 的曲面和平面填充等高线图

₹ 1 展示更多二元瑞利商曲面、等高线示例,请大家逐一分析瑞利商最大值、最小值,以及具体位置。

無面 等高线 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$ x_2 x_1

表 1. 二元瑞利商曲面、等高线



极坐标、单位圆

我们惊奇地发现,二元瑞利商的等高线图呈现出放射状,这表明瑞利商的值似乎与向量的大小无关,而仅仅与其方向直接相关。这让我们立刻想到极坐标这个数学工具。

为了验证我们的猜测, 我们引入平面极坐标

$$\begin{cases} x_1 = r\cos\theta \\ x_2 = r\sin\theta \end{cases} \tag{5}$$

将它们代入到(4)二元瑞利商,可以整理得到

$$R(\theta) = \frac{2r^2 \cos^2 \theta + 2r^2 \sin^2 \theta + 2r^2 \cos \theta \sin \theta}{r^2}$$
$$= 2\cos^2 \theta + 2\sin^2 \theta + 2\cos \theta \sin \theta$$
$$= 2 + \sin(2\theta)$$
 (6)

推导过程中, 我们把 r 消去了。这意味着二元瑞利商只和角度有关, 这印证了前文的猜测。

图 3 所示 (6) 对应的三角函数。我们很容易找到瑞利商最大值、最小值,以及取得最大值、最小值对应的角度。

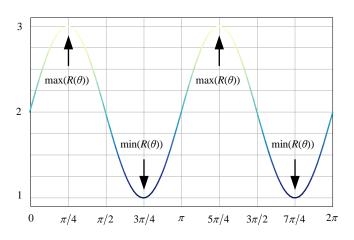
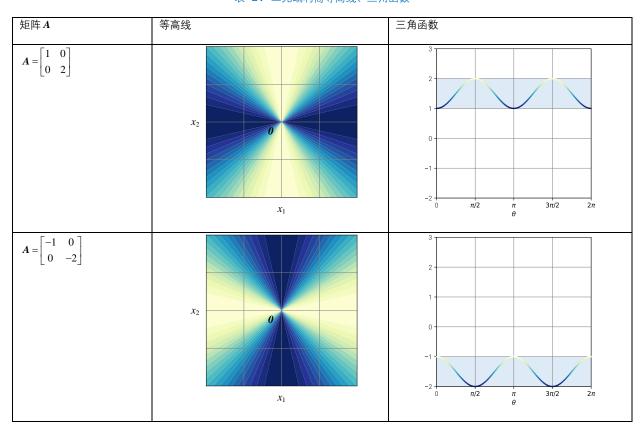
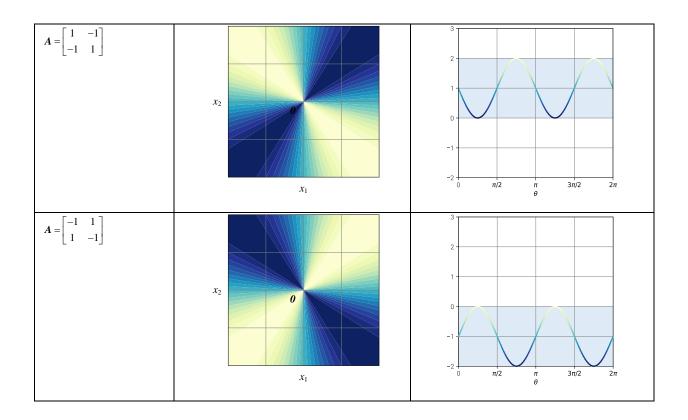


图 3. 二元瑞利商 R(x) 对应的三角函数

?请大家逐个分析表 2 中的三角函数,找到二元瑞利商最大值、最小值,以及对应的具体位置。

表 2. 二元瑞利商等高线、三角函数





单位圆上看二元瑞利商

正是由于瑞利商的分母可以写成 $\|\mathbf{x}\|_2^2$,我们便可以把瑞利商写成

$$R(x) = \frac{x^{\mathrm{T}} A x}{\|x\|^{2}} = \left(\frac{x}{\|x\|}\right)^{\mathrm{T}} A \left(\frac{x}{\|x\|}\right) = \hat{x}^{\mathrm{T}} A \hat{x}$$

$$(7)$$

其中, \hat{x} 是 x 的单位向量 (方向向量)。

对于上式二元瑞利商,单位向量 \hat{x} 的终点都在单位圆圆周上。如图 4 所示,这意味着我们还可以在 单位圆上观察瑞利商。

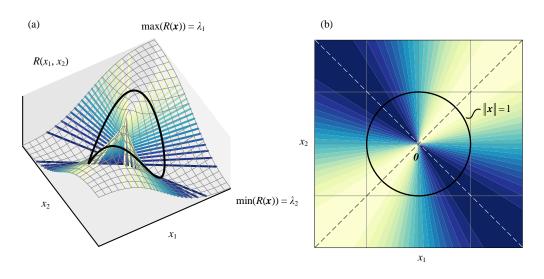


图 4. 二元瑞利商 R(x) 平面填充等高线图,单位圆上观察

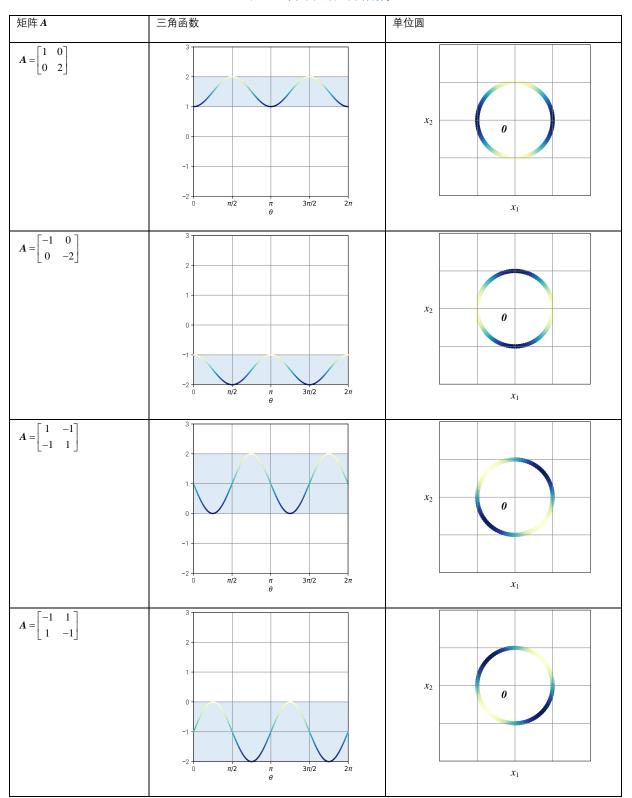
本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。 版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

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

? 请大家逐一分析表 3 每个示例。

表 3. 单位圆上看二元瑞利商



特征值分解

对(3)中A特征值分解(谱分解)得到:

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}} \underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Lambda}} \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}}$$
(8)

把 V 写成列向量 v_1 、 v_2 , 如图 5 所示, v_1 、 v_2 分别对应瑞利商的最大值 λ_1 、最小值 λ_2 方向。

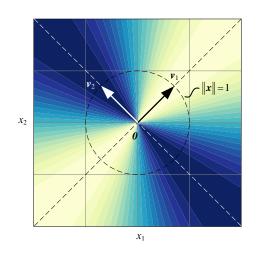


图 5. 二元瑞利商 R(x) 最大值、最小值对应的方向

比如, ν_1 方向上, 瑞利商取得最大值

$$\boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_{1} = \boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{1} = \boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_{1} & \boldsymbol{v}_{2}\end{bmatrix}\boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\\\boldsymbol{v}_{2}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{v}_{1} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{1} & \boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{2}\end{bmatrix}\boldsymbol{A}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{1}\\\boldsymbol{v}_{2}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_{1}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_{1} & 0\\0 & \lambda_{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \lambda_{1} \quad (9)$$

本书前文提过上式是瑞利商的特殊形式。

再如, 火2方向上, 瑞利商取得最小值

$$v_{2}^{\mathsf{T}} A v_{2} = v_{2}^{\mathsf{T}} V A V^{\mathsf{T}} v_{2} = v_{2}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} v_{1} & v_{2} \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} v_{1}^{\mathsf{T}} \\ v_{2}^{\mathsf{T}} \end{bmatrix} v_{2} = \begin{bmatrix} v_{2}^{\mathsf{T}} v_{1} & v_{2}^{\mathsf{T}} v_{2} \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} v_{1}^{\mathsf{T}} v_{2} \\ v_{2}^{\mathsf{T}} v_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_{1} & 0 \\ 0 & \lambda_{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \lambda_{2} (10)$$

三元瑞利商

本书前文介绍过,二维单位向量的起点位于原点的话,这些向量的终点位于单位圆上;类似地,三维单位向量的终点落在单位球上。

我们可以在单位圆上看二元瑞利商,顺理成章地,我们也可以单位球表面观察三元瑞利商。

举个例子, 给定如下 3×3 对称矩阵 A

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 & 1 \\ 0.5 & 2 & -0.2 \\ 1 & -0.2 & 1 \end{bmatrix} \tag{11}$$

上述对称矩阵对应的瑞利商为

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2 + x_1x_2 + 2x_1x_3 - 0.4x_2x_3}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$$
(12)

图 6 所示为在单位圆上看上述三元瑞利商。

矩阵 A 的三个特征值分别为 2.272、1.844、-0.117 (仅保留三位小数)。因此,(12) 瑞利商最大值为 2.272,最小值为-0.117。

?请大家计算(11)中矩阵A的特征向量。

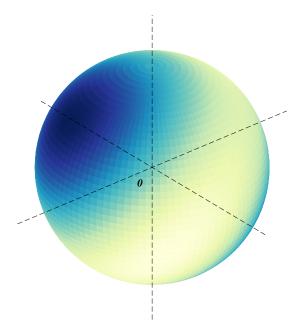


图 6. 在单位球上观察三元瑞利商

为了更容易看到三元瑞利商的全貌,把图 6的球体想象成一个地球,我们可以创作一幅"瑞利商"地球地图,用经纬度作为坐标展示瑞利商。

如图 7 所示, θ 是 OP 连线和 x_3 轴正方向夹角,叫做**极角** (polar angle),球坐标 θ 取值范围为 $[0, \pi]$ 。这个角度相当于地球的"纬度角"。

OP 连线在 x_1x_2 平面投影线为 OH, φ 是 OH 和 x_1 轴正方向夹角,叫做**方位角** (azimuth angle)。球坐标 φ 取值范围为 $[0, 2\pi]$ 。这个角度相当于地球的"经度角"。

请回顾本书第1章第5节介绍的球坐标。

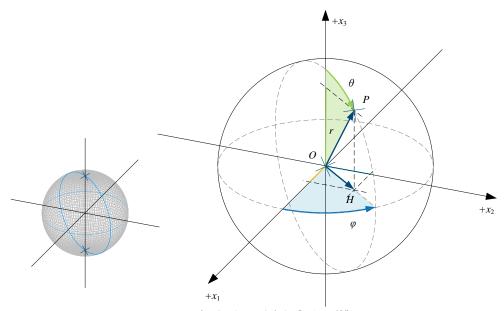


图 7. 球坐标系,图片来自《可视之美》

图 8 所示为"经纬度"视角看三元瑞利商。

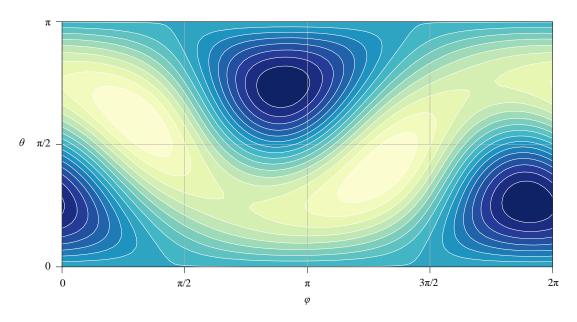
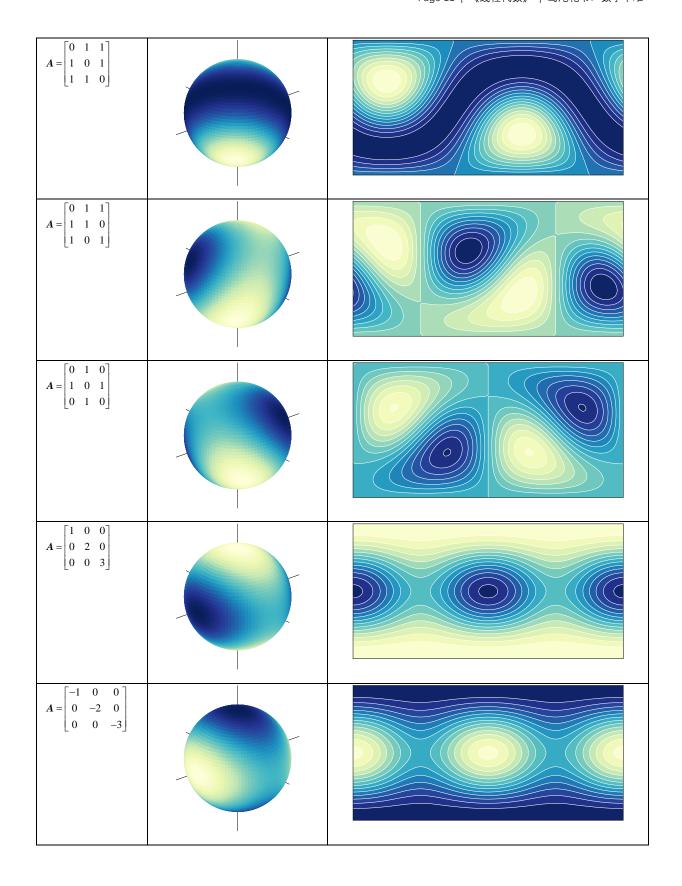


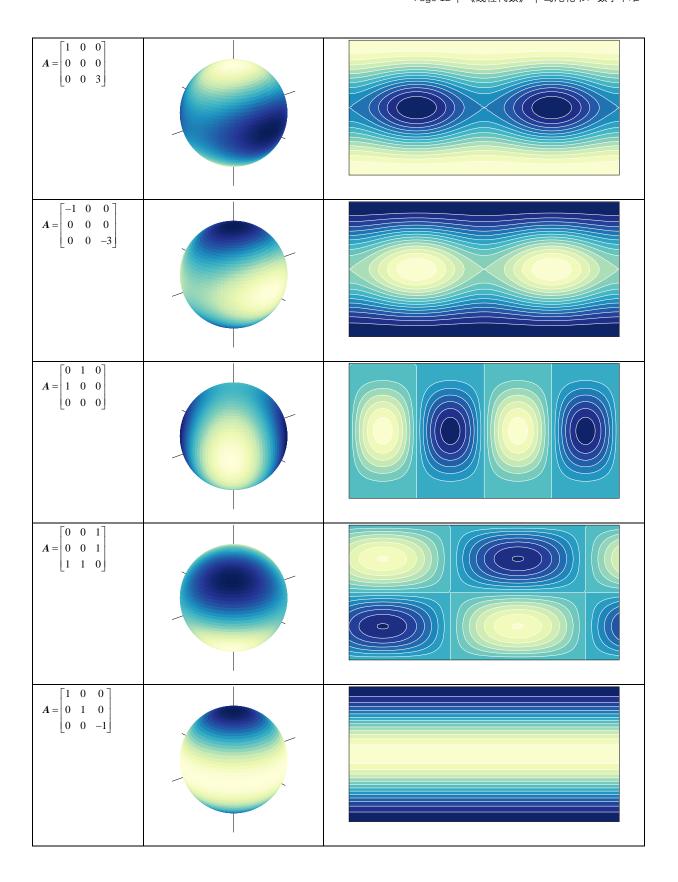
图 8. "经纬度"视角看三元瑞利商

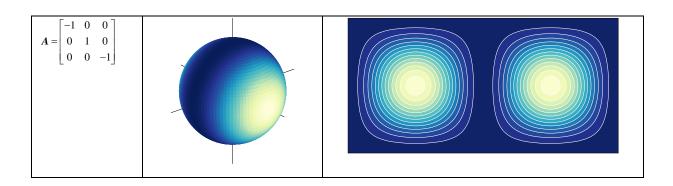
? 请大家逐个分析表 4 展示的三元瑞利商,指出最大值、最小值位置。

表 4. 单位球上看三元瑞利商

矩阵 A	单位球视角	经纬度视角









请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

- **Q1.** 请计算表 1 中矩阵 A 特征值分解结果,比如特征值、特征向量。并指出对应瑞利商的最大值、最小值。
- Q2. 请计算表2每个三角函数,并指出最大值、最小值,以及对应的角度。
- Q3. 请计算表 3 中矩阵 A 瑞利商的最大值、最小值。
- Q4. 请了解广义瑞利商。