瑞利（Rayleigh）商

耿修瑞

中国科学院空天信息创新研究院

gengxr@sina.com.cn

2025.4

- Rayleigh商
- 广义Rayleigh商
- 应用

Rayleigh商

Rayleigh商问题定义

对于实对称矩阵**A**，其Rayleigh商定义为

$$R(\mathbf{x}) = R(\mathbf{A}, \mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$$

实际应用中一般是寻找满足上述公式达到最大或者最小的向量 $\mathbf{x}$

Rayleigh商

Rayleigh-Ritz定理

对于实对称矩阵**A**，假设其特征值满足如下次序 $\lambda_{\min}=\lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n=\lambda_{\max}$，则

$$\max_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \lambda_{\max}, \quad 若\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda_{\max}\mathbf{x}$$

$$\min_{\mathbf{x}\neq\mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \min_{\|\mathbf{x}\|=1} \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \lambda_{\min}, \quad 若\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda_{\min}\mathbf{x}$$

Rayleigh商

Rayleigh-Ritz定理

证明：

对矩阵做特征分解：$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T$

其中 $\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$

$$\lambda_{\min} = \lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n = \lambda_{\max}$$

因此

$$\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{U}\Lambda\mathbf{U}^T\mathbf{x} \overset{令\mathbf{z}=\mathbf{U}^T\mathbf{x}}{=} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i z_i^2$$

显然有 $$\lambda_{\min}\sum_{i=1}^{n} z_i^2 \le \sum_{i=1}^{n} \lambda_i z_i^2 \le \lambda_{\max}\sum_{i=1}^{n} z_i^2$$

Rayleigh商

Rayleigh-Ritz定理

又因为 $$\sum_{i=1}^{n} z_i^2 = \mathbf{z}^T\mathbf{z} = \left(\mathbf{U}^T\mathbf{x}\right)^T \mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

所以

$$\lambda_{\min}\mathbf{x}^T\mathbf{x} \le \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} \le \lambda_{\max}\mathbf{x}^T\mathbf{x}$$

$$\lambda_{\min} \le \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} \le \lambda_{\max}$$

Rayleigh商

单纯形法

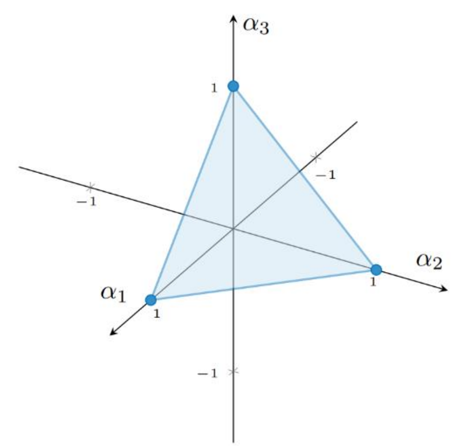
$$R(\mathbf{A},\mathbf{x})=\frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}=\frac{\mathbf{x}^T\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^T\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}=\frac{\left(\mathbf{U}^T\mathbf{x}\right)^T\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^T\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}=\sum_{i=1}^{n}\frac{\left(\mathbf{u}_i^T\mathbf{x}\right)^2}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}\lambda_i$$

令 $\alpha_i=\frac{\left(\mathbf{u}_i^T\mathbf{x}\right)^2}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}$， 则 $\sum_{i=1}^{n}\alpha_i=\sum_{i=1}^{n}\frac{\left(\mathbf{u}_i^T\mathbf{x}\right)^2}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}=\frac{\left(\mathbf{U}^T\mathbf{x}\right)^T\mathbf{U}^T\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}=1$

于是，瑞利商极大值问题可以转化为如下线性规划模型

$$\begin{cases}\max\limits_{\boldsymbol{\alpha}} R(\mathbf{A},\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\lambda_i=\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\alpha}\\ s.t.\ \mathbf{1}^T\boldsymbol{\alpha}=1,\boldsymbol{\alpha}\geq\mathbf{0}\end{cases}$$

有限维线性规划的最优解，在其可行域的顶点达到



广义Rayleigh商

广义Rayleigh商（第一种类型）

对于实对称矩阵**A**和实正定对称矩阵**B**。矩阵束（**A**，**B**）的广义Rayleigh商定义为

$$R(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}}$$

实际应用中一般是寻找满足上述公式达到最大或者最小的向量 $\mathbf{x}$

广义Rayleigh商

广义Rayleigh商最大（小）值条件

对于实对称矩阵**A**和正定实对称矩阵**B**，假设$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$的特征值满足$\lambda_{\min}=\lambda_1\le\lambda_2\le\cdots\le\lambda_n=\lambda_{\max}$，则

$$R(\mathbf{x})=\frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}}=\lambda_{\max}, \qquad \text{若}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda_{\max}\mathbf{x}$$

$$R(\mathbf{x})=\frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}}=\lambda_{\min}, \qquad \text{若}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda_{\min}\mathbf{x}$$

广义Rayleigh商应用-典范分析

广义Rayleigh商最大（小）值条件

$$\frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{x}} \overset{\tilde{\mathbf{x}}=\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{x}}{=} \frac{\tilde{\mathbf{x}}^T\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1/2}\tilde{\mathbf{x}}}{\tilde{\mathbf{x}}^T\tilde{\mathbf{x}}}$$

因此广义瑞利商问题可以转化为瑞利商问题

$$\mathbf{B}^{-1/2}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1/2}\tilde{\mathbf{x}} = \lambda\tilde{\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1/2}\tilde{\mathbf{x}} = \lambda\mathbf{B}^{-1/2}\tilde{\mathbf{x}}$$

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

广义Rayleigh商

广义Rayleigh商（第二种类型）

对于矩阵**A**，**以及两个对称**正定对称矩阵**B**，**C**。第二种广义瑞利商定义如下

$$R(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x}\mathbf{y}^T\mathbf{C}\mathbf{y}}}$$

它的极值问题可以转华为如下优化问题：

$$\begin{cases} \max\limits_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{y} \\ s.t.\ \mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{y}^T\mathbf{C}\mathbf{y} = 1 \end{cases}$$

广义Rayleigh商应用

- PCA

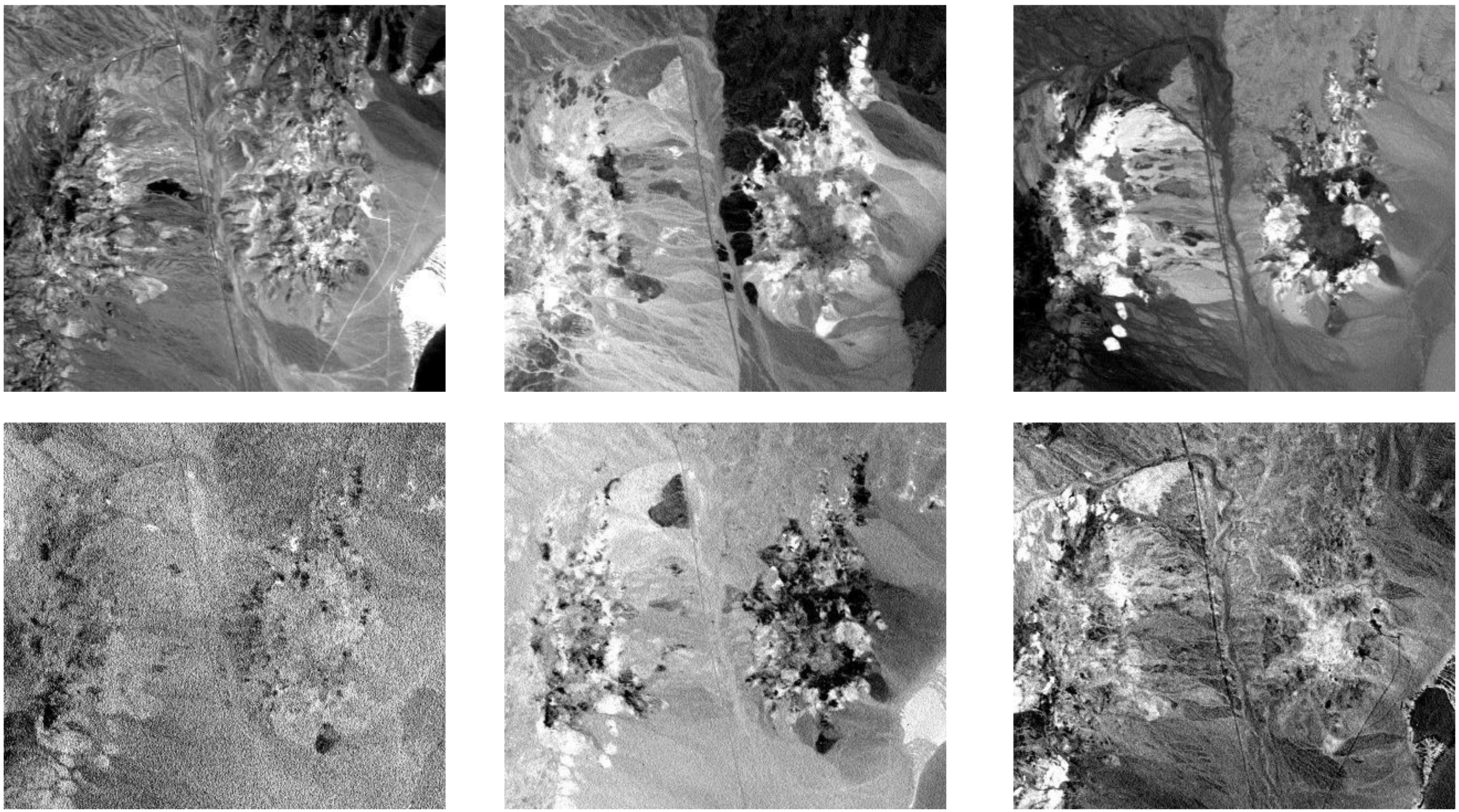
$$\begin{cases} \max\limits_{\mathbf{u}} \mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u} \\ s.t \ \mathbf{u}^T \mathbf{u} = 1 \end{cases} \quad \text{等价于} \quad \max_{\mathbf{u}} \frac{\mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u}}{\mathbf{u}^T \mathbf{u}}$$

样本协方差矩阵 Σ $\qquad \Sigma \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$

PCA可以看做一个瑞利商问题。

广义Rayleigh商应用

PCA实例



广义Rayleigh商应用

- MNF变换（高光谱）

$$\min \frac{\mathbf{u}^T \Sigma_N \mathbf{u}}{\mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u}}$$ 最小噪声分量

或者

$$\max \frac{\mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u}}{\mathbf{u}^T \Sigma_N \mathbf{u}}$$ 最大信噪比

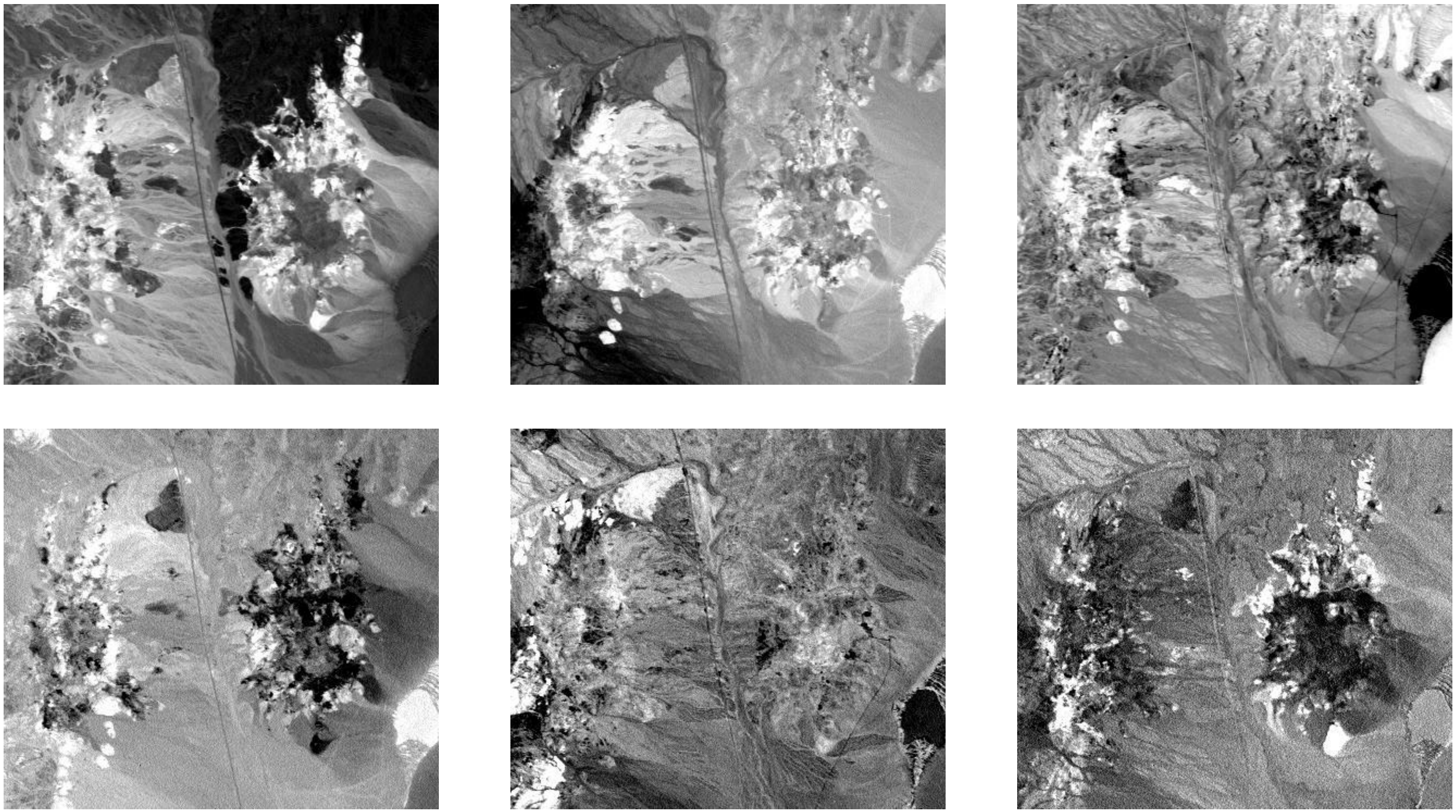
样本协方差矩阵 Σ

噪声协方差矩阵 Σ_N

$$\Sigma_N^{-1} \Sigma \mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$$

广义Rayleigh商应用

MNF实例



广义Rayleigh商应用

- 目标检测（高光谱）

样本自相关矩阵 $\mathbf{R} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{r}_i\mathbf{r}_i^T$

目标光谱 $\mathbf{d}$

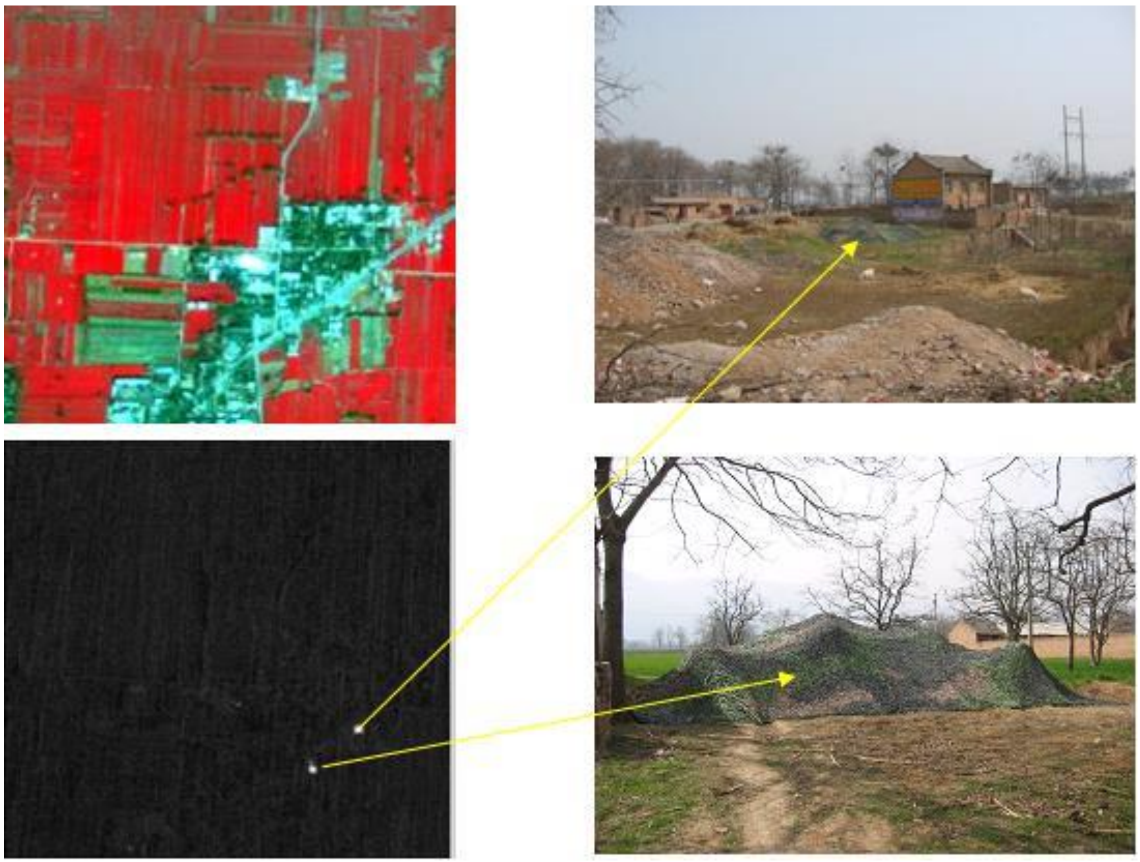
$$\max_{\mathbf{u}} \frac{\mathbf{u}^T\mathbf{d}\mathbf{d}^T\mathbf{u}}{\mathbf{u}^T\mathbf{R}\mathbf{u}}$$

$$\mathbf{R}^{-1}\mathbf{d}\mathbf{d}^T\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u} \Rightarrow \mathbf{u} = k\mathbf{R}^{-1}\mathbf{d}$$

$$\mathbf{u}_{CEM} = \frac{\mathbf{R}^{-1}\mathbf{d}}{\mathbf{d}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{d}}$$

广义Rayleigh商应用

目标检测实例



广义Rayleigh商应用

线性判别分析（面向监督分类）

$$\max_{\mathbf{u}} \frac{\mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u}}{\mathbf{u}^T \mathbf{W} \mathbf{u}}$$

假设*N*个像元一共可以分为*k*类，类别数分别为 $n_1, n_2, \cdots, n_k$ 每一个的元素记为

$$X_{ij}, i = 1, 2, \cdots, k. \quad j = 1, 2, \cdots, n_i$$

则

$$\bar{X}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \bar{X}_{ij}$$

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} X_{ij}$$

Among groups

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{k} n_i \left(\bar{X}_i - \bar{X}\right)\left(\bar{X}_i - \bar{X}\right)^T$$

Within groups

$$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} \left(X_{ij} - \bar{X}_i\right)\left(X_{ij} - \bar{X}_i\right)^T$$

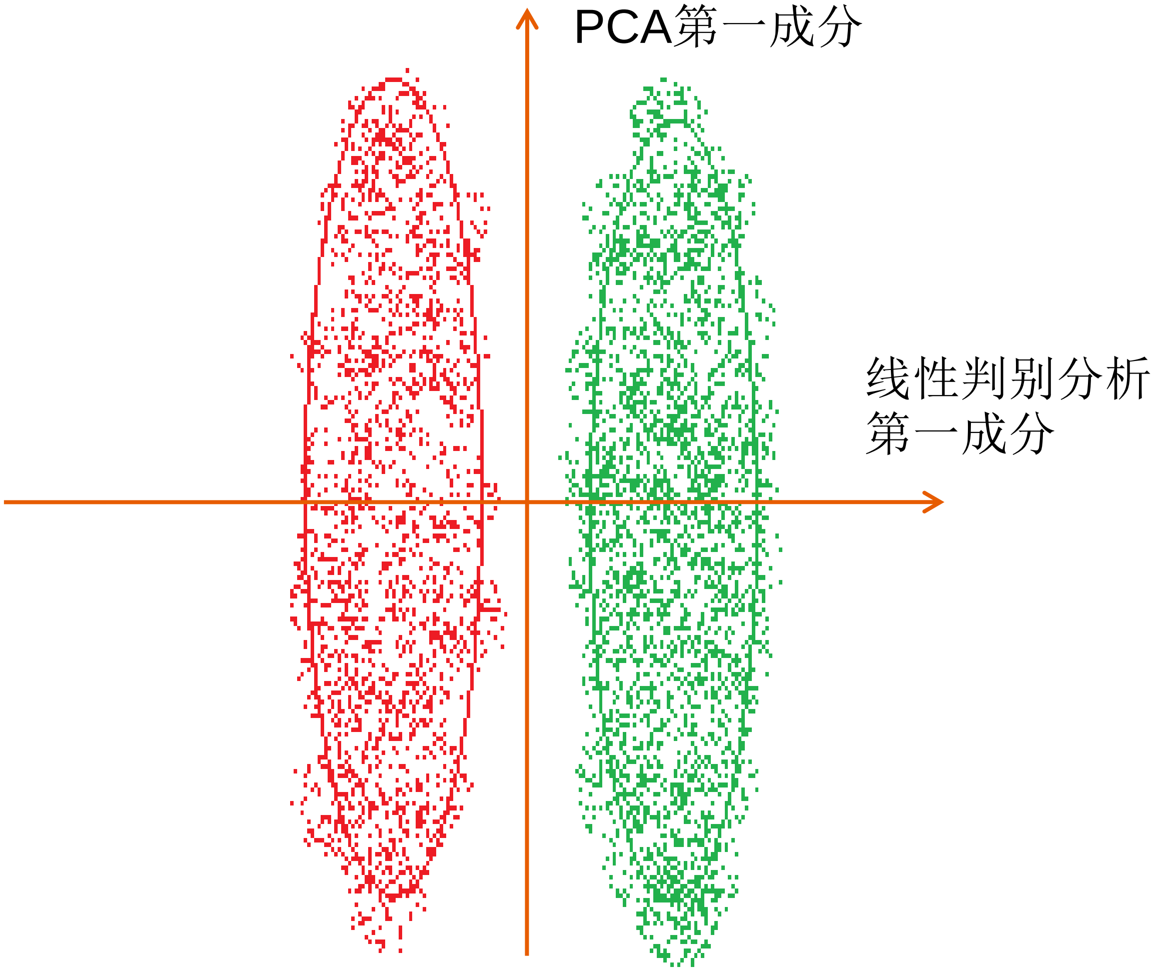
Total

$$\mathbf{T} = \mathbf{A} + \mathbf{W} = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} \left(X_{ij} - \bar{X}\right)\left(X_{ij} - \bar{X}\right)^T$$

$$\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}$$

广义Rayleigh商应用

线性判别分析示例



广义Rayleigh商应用

- 谱聚类（归一化割）

$$\min_{\mathbf{y}} \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{L} \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T \mathbf{D} \mathbf{y}}$$

$\mathbf{L}$ 拉普拉斯矩阵

$\mathbf{D}$ 度矩阵

广义Rayleigh商应用

- 典型相关分析

$$\max_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \frac{\mathbf{u}^T \Sigma_{12} \mathbf{v}}{\sqrt{\mathbf{u}^T \Sigma_{11} \mathbf{u} \mathbf{v}^T \Sigma_{22} \mathbf{v}}}$$

$\Sigma_{11}, \Sigma_{22}, \Sigma_{12}$ 分别为两组向量的自相关和互相关矩阵

广义Rayleigh商应用

- 曲面的法曲率、主曲率、高斯曲率和平均曲率

$$\min_{\mathbf{y}} \frac{L(du)^2 + 2Mdudv + N(dv)^2}{E(du)^2 + 2Fdudv + G(dv)^2} = \frac{\mathrm{II}}{\mathrm{I}}$$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \qquad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} E & F \\ F & G \end{bmatrix}, \mathbf{B} = \begin{bmatrix} L & M \\ M & N \end{bmatrix}$$

$$K = \lambda_1\lambda_2 = \det\left(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right) = \frac{\det(\mathbf{B})}{\det(\mathbf{A})}, \text{高斯曲率}$$

$$H = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) = \frac{1}{2} tr\left(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\right), \text{平均曲率}$$

广义Rayleigh商应用

- 局部线性嵌入
- 自然频率估计
- 正交子空间投影
- 。。。

谢　谢

耿修瑞

中国科学院空天信息创新研究院

gengxr@sina.com.cn