

Dive into Singular Value Decomposition

四种类型、数据还原、正交化



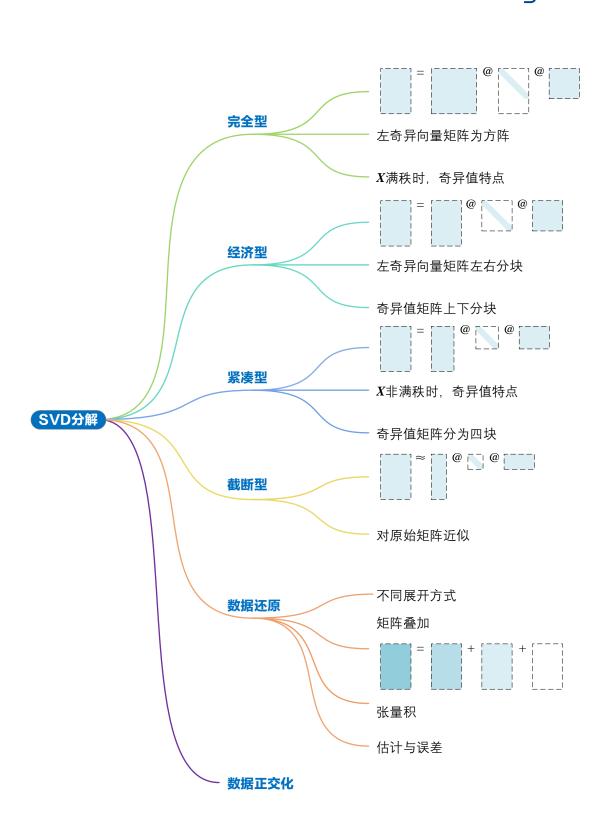
人不过是一根芦苇,世界最脆弱的生灵;但是,人是会思考的芦苇。

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

16.1 完全型: U为方阵

上一章介绍过奇异值分解有四种类型:

- **■** 完全型 (full);
- ◆ 经济型 (economy-size, thin);
- ◀ 紧凑型 (compact);
- **截断型 (truncated)**。

本章将深入介绍这四种奇异值分解。

首先回顾完全型 SVD 分解。图 1 所示为矩阵 $X_{6\times4}$ 进行完全 SVD 分解的结果热图。一般情况,丛书常见的数据矩阵 X 形状 n>D,即细高型。

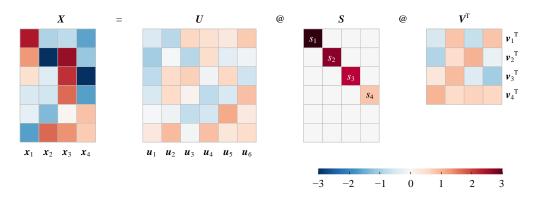


图 1. 数据 X 完全型 SVD 分解矩阵热图

完全型 SVD 分解中,左奇异向量矩阵 U 为方阵,形状为 $n \times n$ 。 $U = [u_1, u_2, ..., u_n]$ 是张成 \mathbb{R}^n 空间的规范正交基。

 $S_{n\times D}$ 的形状和 X 相同,为 $n\times D$ 。虽然 $S_{n\times D}$ 也是对角阵,但是它不是方阵。

如果 X 满秩, rank(X) = D, S 的主对角线元素 (奇异值 s_i) 一般大小关系为:

$$s_1 \ge s_2 \ge \cdots s_D > 0 \tag{1}$$

右奇异向量矩阵 V 形状为 $D \times D$ 。 $V = [v_1, v_2, ..., v_D]$ 是张成 \mathbb{R}^D 空间的规范正交基。

→本章大量使用分块矩阵乘法法则,大家如果感到吃力,请回顾本书第6章。



Bk4 Ch16 01.py 中 Bk4 Ch16 01 A 部分绘制图 1。

16.2 经济型: S去掉零矩阵,变方阵

在完全型 SVD 分解基础上,长方对角阵 $S_{n\times D}$ 上下分块为一个对角方阵和一个零矩阵 O:

$$S_{n \times D} = \begin{bmatrix} s_1 & & & & \\ & s_2 & & & \\ & & s_2 & & \\ & & s_D & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{D \times D} \\ O_{(n-D) \times D} \end{bmatrix}$$
(2)

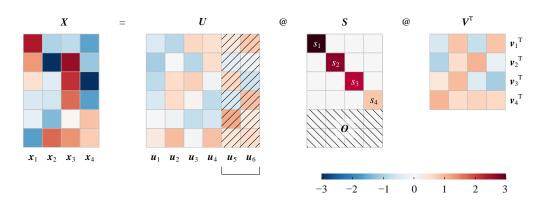
将 $U_{n\times n}$ 写成左右分块矩阵 $[U_{n\times D}, U_{n\times (n-D)}]$, 其中 $U_{n\times D}$ 和 X 形状相同。

利用分块矩阵乘法,完全型 SVD 分解可以简化成经济型 SVD 分解:

$$\boldsymbol{X}_{n \times D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_{n \times D} & \boldsymbol{U}_{n \times (n-D)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_{D \times D} \\ \boldsymbol{O}_{(n-D) \times D} \end{bmatrix} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \\
= \left(\boldsymbol{U}_{n \times D} \boldsymbol{S}_{D \times D} + \boldsymbol{U}_{n \times (n-D)} \boldsymbol{O}_{(n-D) \times D} \right) \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \\
= \boldsymbol{U}_{n \times D} \boldsymbol{S}_{D \times D} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{3}$$

图 2 和图 3 比较完全型和经济型 SVD 分解结果热图。图 2 中阴影部分为消去的矩阵子块。比较完全型和经济型 SVD,分解结果中唯一不变的就是矩阵 V,它一直保持方阵形态。

 \longrightarrow 从向量空间角度来讲, $U_{n\times D}$ 和 $U_{n\times (n-D)}$ 有怎样的差异和联系?这是本书第 23 章要回答的问题。



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

图 2. 数据 X 完全型 SVD 分解分块热图

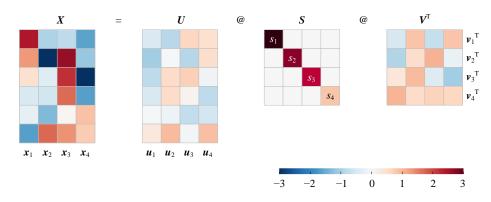


图 3. 数据 X 经济型 SVD 分解热图



Bk4 Ch16 01.py 中Bk4 Ch16 01 B部分绘制图3。

16.3 紧凑型: 非满秩

本节介绍在经济型 SVD 分解基础上获得紧凑型 SVD 分解。

特别地,如果 rank(X) = r < D,奇异值 s_i 满足:

$$s_1 \ge s_2 \ge \dots s_r > 0, \quad s_{r+1} = s_{r+2} = \dots s_D = 0$$
 (4)

这种条件下,经济型 SVD 分解得到的奇异值方阵 S 可以分成四个子块:

$$S = \begin{bmatrix} S_{r \times r} & O_{r \times (D-r)} \\ O_{(D-r) \times r} & O_{(D-r) \times (D-r)} \end{bmatrix}$$
 (5)

上式中, 矩阵 $S_{r\times r}$ 对角线元素奇异值均大于 0。

将 (5) 代入完全型 SVD 分解 (3), 整理得到:

$$\boldsymbol{X}_{n \times D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_{n \times r} & \boldsymbol{U}_{n \times (D-r)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_{r \times r} & \boldsymbol{O}_{r \times (D-r)} \\ \boldsymbol{O}_{(D-r) \times r} & \boldsymbol{O}_{(D-r) \times (D-r)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{V}_{D \times r} & \boldsymbol{V}_{D \times (D-r)} \end{bmatrix}^{T} \\
= \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_{n \times r} \boldsymbol{S}_{r \times r} & \boldsymbol{O}_{n \times (D-r)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\boldsymbol{V}_{D \times r})^{T} \\ (\boldsymbol{V}_{D \times (D-r)})^{T} \end{bmatrix} \\
= \boldsymbol{U}_{n \times r} \boldsymbol{S}_{r \times r} (\boldsymbol{V}_{D \times r})^{T}$$
(6)

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

大家特别注意 (6) 中,矩阵 V 先分块后再转置。

图 4 和图 5 比较经济型和紧凑型 SVD 分解,图 4 阴影部分为消去子块。为了展示紧凑型 SVD 分解,我们用X第一、二列数据之和替代X矩阵第四列,即 $x_4 = x_1 + x_2$ 。这样X矩阵列向量线性 相关,rank(X) = 3,而 $s_4 = 0$ 。再次强调,只有 X 为非满秩情况下,才存在紧缩型 SVD 分解。紧 缩型 SVD 分解中,U 和 V 都不是方阵。

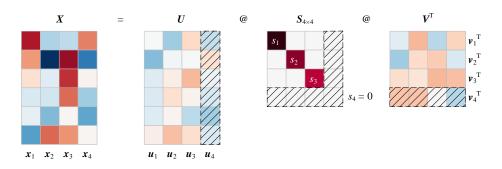


图 4. 数据 X 经济型 SVD 分解热图

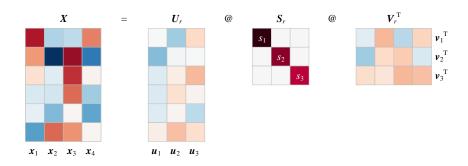


图 5. 数据 X 紧凑型 SVD 分解热图



Bk4 Ch16 01.py 中 Bk4 Ch16 01 C 部分绘制图 4。

如果 $rank(X) = r \le D$,取经济型奇异值分解中前 p 个奇异值 (p < r) 对应的 $U \setminus S \setminus V$ 矩阵成 分,用它们还原原始数据就是截断型奇异值分解:

$$\boldsymbol{X}_{n \times D} \approx \hat{\boldsymbol{X}}_{n \times D} = \boldsymbol{U}_{n \times p} \boldsymbol{S}_{p \times p} \left(\boldsymbol{V}_{D \times p} \right)^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

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

请大家自行补足上式中矩阵分块和对应的乘法运算。

(7) 不是等号,也就是截断型奇异值分解不能完全还原原始数据。换句话,截断型奇异值分解是对原矩阵 X 的一种近似。图 6 所示为 SVD 截断型分解热图,可以发现 $X_{\tiny{nxD}}$ 和 $\hat{X}_{\tiny{nxD}}$ 两幅热图存在一定"色差"。

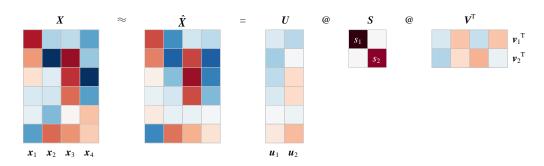


图 6. 采用截断型 SVD 分解还原数据运算热图



Bk4 Ch16 01.py 中 Bk4 Ch16 01 D 绘制图 6。

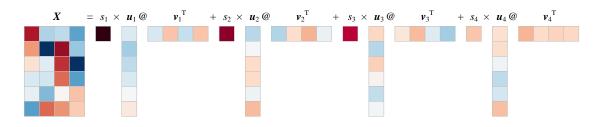
16.5 数据还原:层层叠加

上一章介绍过,经济型 SVD 分解可以展开写作:

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

$$= \underbrace{\boldsymbol{s}_{\scriptscriptstyle 1}} \boldsymbol{u}_{\scriptscriptstyle 1} \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle 1}^{\scriptscriptstyle T} + \underbrace{\boldsymbol{s}_{\scriptscriptstyle 2}} \boldsymbol{u}_{\scriptscriptstyle 2} \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle 2}^{\scriptscriptstyle T} + \cdots + \underbrace{\boldsymbol{s}_{\scriptscriptstyle D}} \boldsymbol{u}_{\scriptscriptstyle D} \boldsymbol{v}_{\scriptscriptstyle D}^{\scriptscriptstyle T} \\ \boldsymbol{x}_{\scriptscriptstyle D} \end{bmatrix}$$
(8)

上式中奇异值从大到小排列,即 $s_1 \ge s_2 \ge \dots s_D$ 。图 7 所示上述运算热图,D = 4。



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

图 7. SVD 分解展开计算热图

组成部分

定义矩阵 X_i 为:

$$\boldsymbol{X}_{j} = \boldsymbol{s}_{j} \boldsymbol{u}_{j} \boldsymbol{v}_{j}^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

矩阵 X_i 形状和 X 相同。图 8 所示为矩阵 X_i (j = 1, 2, 3, 4) 计算过程热图。

观察图 8 每幅矩阵 X_i 热图不难发现,矩阵 X_i 自身列向量之间存在倍数关系。也就是说,矩阵 X_i 的秩为 1,即 $\operatorname{rank}(X_i) = 1$ 。

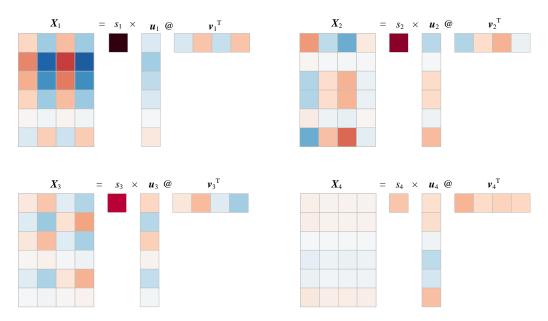


图 8. 还原数据的叠加成分

还原

(9)代入(8)得到:

$$X_{n \times D} = X_1 + X_2 + \dots + X_D \tag{10}$$

当 $j=1\sim D$ 时,将 X_j 一层层叠加、最后还原原始数据矩阵 X,如图 9 所示。

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

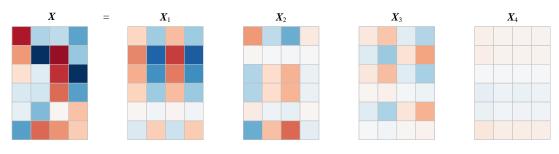


图 9. 还原原始数据

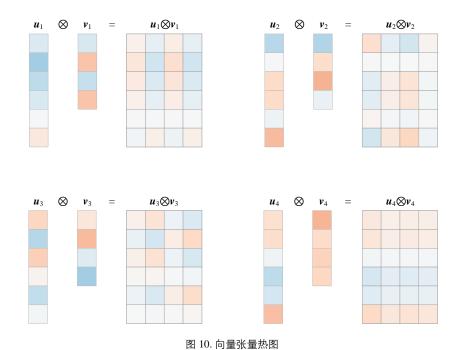
张量积

利用向量张量积, (8) 可以写成:

$$\boldsymbol{X} = \underline{\boldsymbol{s}_{1}\boldsymbol{u}_{1} \otimes \boldsymbol{v}_{1}}_{\hat{\boldsymbol{X}}_{1}} + \underline{\boldsymbol{s}_{2}\boldsymbol{u}_{2} \otimes \boldsymbol{v}_{2}}_{\hat{\boldsymbol{X}}_{2}} + \dots + \underline{\boldsymbol{s}_{D}\boldsymbol{u}_{D} \otimes \boldsymbol{v}_{D}}_{\hat{\boldsymbol{X}}_{D}} = \sum_{j=1}^{D} \boldsymbol{s}_{j}\boldsymbol{u}_{j} \otimes \boldsymbol{v}_{j}$$

$$(11)$$

图 10 所示为张量积 $u_i \otimes v_j$ 计算热图,可以发现热图色差并不明显。这说明 $u_i \otimes v_j$ 本身并不能区分 X_i ,这是因为 u_i 和 v_i 都是单位向量。本书前文提过, u_i 和 v_i 都不含单位。



然后再用奇异值 s_j 乘以对应张量积 $u_j \otimes v_j$ 得到 X_j ,具体如图 11 所示。可以发现 X_1 热图色差最明显。也就是说,奇异值 s_j 的大小决定了成分的重要性,而 u_j 和 v_j 决定了投影方向。

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

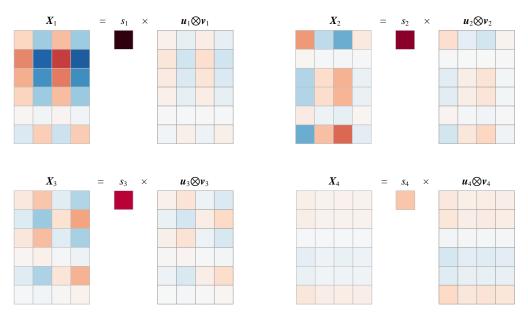


图 11. 奇异值标量乘张量积结果

正交投影

上一章指出 v_i 和 u_i 存在如下关系:

$$Xv_{i} = s_{i}u_{i} \tag{12}$$

将(12)代入(11),就得到:

$$X = \underbrace{X \mathbf{v}_{1} \otimes \mathbf{v}_{1}}_{\dot{\mathbf{x}}_{1}} + \underbrace{X \mathbf{v}_{2} \otimes \mathbf{v}_{2}}_{\dot{\mathbf{x}}_{2}} + \dots + \underbrace{X \mathbf{v}_{D} \otimes \mathbf{v}_{D}}_{\dot{\mathbf{x}}_{D}}
= X \left(\mathbf{v}_{1} \otimes \mathbf{v}_{1} + \mathbf{v}_{2} \otimes \mathbf{v}_{2} + \dots + \mathbf{v}_{D} \otimes \mathbf{v}_{D} \right)$$
(13)

这就是本书第 9、10 章反复提到的"二次投影 + 层层叠加"。以 ν_1 为例,数据 X 在 span(ν_1) 中投影在 \mathbb{R}^D 中的像就是 $X\nu_1\otimes\nu_1$ 。 span(ν_1) 是 \mathbb{R}^D 的子空间,维度为 1。这就意味着 $X\nu_1\otimes\nu_1$ 的秩为 1,即 rank($X\nu_1\otimes\nu_1$)=1。

之所以选择 ν_1 做第一投影方向,就是因为在所有的一维方向中, ν_1 方向对应的奇异值 s_1 最大。大家可能又会好奇,几何视角下,奇异值 s_1 到底是什么?卖个关子,这个问题在本书第 18章回答。



Bk4 Ch16 01.py 中 Bk4 Ch16 01 E 计算张量积并绘制热图。

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

16.6 估计与误差: 截断型 SVD

把数据矩阵 X 对应的热图看做一幅图像,本节介绍如何采用较少数据尽可能还原原始图像,并准确知道误差是多少。

两层叠加

奇异值按大小排列,选取 s1和 s2还原原始数据,其中 s1最大, s2其次。

根据上一节讨论,从图像还原角度, s_1 对应 X_1 , X_1 还原了 X 图像大部分特征; s_2 对应 X_2 , X_2 在 X_1 基础上进一步还原 X。

 X_1 和 X_2 叠加得到 \hat{X} 。如图 12 所示,X 和 \hat{X} 热图的相似度已经很高:

$$\boldsymbol{X}_{n \times D} \approx \hat{\boldsymbol{X}}_{n \times D} = \boldsymbol{X}_1 + \boldsymbol{X}_2 \tag{14}$$

X和 \hat{X} 热图误差矩阵为:

$$\boldsymbol{E}_{\varepsilon} = \boldsymbol{X}_{\text{nxD}} - \hat{\boldsymbol{X}}_{\text{nxD}} \tag{15}$$

我们给 E_{ε} 加了个下角标,以便区分标准正交基 E_{ε}

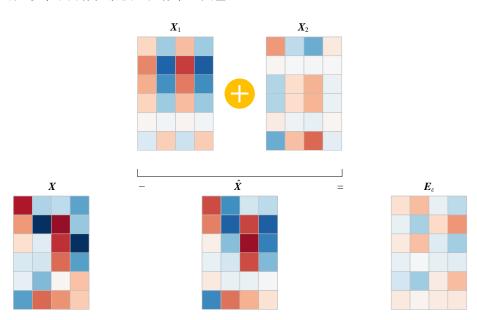


图 12. 利用前两个奇异值对应的矩阵还原数据

将 (14) 展开写成:

$$\boldsymbol{X} \approx \hat{\boldsymbol{X}} = s_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} + s_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 & \\ & s_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{T}} \\ & \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$
(16)

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

上式实际上就是主成分分析中, 用前两个主元还原原始数据对应的计算, 具体热图如图 13 所 示。

→本系列丛书《概率统计》一册将从中心化数据、Z分数、协方差矩阵、相关性系数矩阵 等角度讲解主成分分析的不同技术途径,而《数据科学》一册将从数据应用角度再谈主成分分 析。

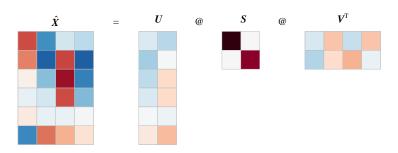


图 13. 用前两个主元还原原始数据

三层叠加

图 14 所示为利用前三个奇异值对应矩阵还原数据,可以发现 X 和 \hat{X} 热图误差进一步缩小。

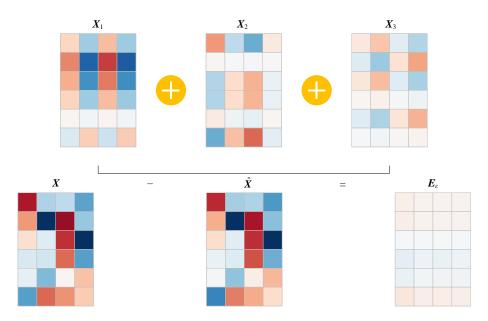


图 14. 利用前三个奇异值对应的矩阵还原数据

当 D=4 时,采用 s_1 、 s_2 、 s_3 还原原始数据时,误差 E_ε 只剩一个成分:

$$\boldsymbol{X} - \hat{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{s_4} \boldsymbol{u_4} \boldsymbol{v_4}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{X} \boldsymbol{v_4} \otimes \boldsymbol{v_4} \tag{17}$$

如果采用全部成分还原原始数据,请大家自行计算误差矩阵是否为0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



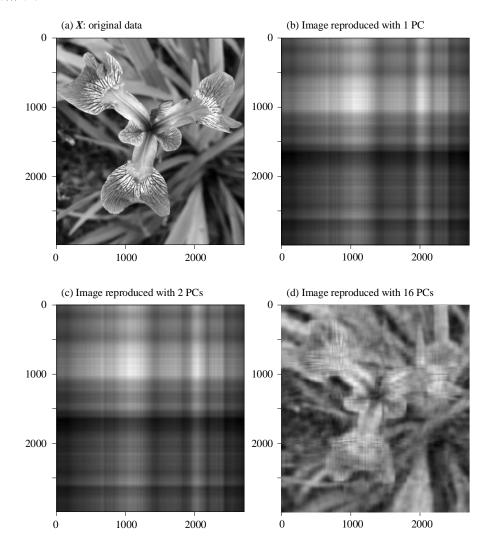
Bk4_Ch16_01.py 中 Bk4_Ch16_01_F 绘制本节数据还原和误差热图。



在 Bk4_Ch16_01.py 基础上,我们用 Streamlit 做了一个 App,用不同数量成分还原鸢尾花原始数据矩阵 X。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch16_01.py。

鸢尾花照片

我们在本书第 1 章见过图 15 (a) 这幅鸢尾花照片,这张黑白照片本身就是数据矩阵。对这个数据矩阵进行奇异值分解,并依照本节介绍的数据还原方法用不同**主成分** (Principal Component, PC) 还原原始图片。



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 15. 还原原始图片

这个主成分对应的投影方向就是本节规范正交基向量 v_1 、 v_2 、 v_3 等等。图 15 (b) 和 (c) 所示为 分别采用一个和两个主成分还原原始图片,我们还很难从图片中看到鸢尾花的踪影。从向量空间 角度来说,图 15 (b) 图片的数据的秩为 1,维度也是 1;图 15 (c) 图片的数据的秩为 2,维度也是 2。图 15 (d) 则是采用前 16 个主成分还原原始图片,图片中已经明显看到鸢尾花样子,而这幅图片 的数据量却小于原图像的1%。



本系列丛书《数据科学》还会采用图15这个例子深入探讨主成分分析。

本书之前第 10 章介绍过,下式相当于数据矩阵 X 向规范正交基 $V = [v_1, v_1, ..., v_D]$ 构成的 D维空间投影:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{V} \tag{18}$$

乘积结果 Z 代表 X 在新的规范正交基 [$\nu_1, \nu_1, ..., \nu_D$] 下的坐标。本章介绍的 SVD 分解恰好帮 我们找到了一个规范正交基 V。本节聊聊投影结果 Z 的性质。

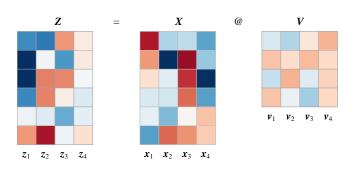


图 16. X 向规范正交基 V 投影

由于 X = USVT, 代入 (18) 得到:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}\mathbf{V} = \mathbf{U}\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{1} & \mathbf{u}_{2} & \cdots & \mathbf{u}_{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{1} & & & \\ & s_{2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_{D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{1}\mathbf{u}_{1} & s_{2}\mathbf{u}_{2} & \cdots & s_{D}\mathbf{u}_{D} \end{bmatrix}$$
(19)

即,

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{z}_1 & \boldsymbol{z}_2 & \cdots & \boldsymbol{z}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{z}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boldsymbol{s}_1 \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{s}_2 \boldsymbol{u}_2 & \cdots & \boldsymbol{s}_D \boldsymbol{u}_D \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}} \tag{20}$$

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

如图 17 所示,上式给了我们计算 **Z** 的第二条路径。换句话说, u_i 实际上就是"单位化"的投影 坐标, $s_i \ge z_i$ 向量的模,即 $||\mathbf{X}\mathbf{v}_i|| = ||z_i|| = ||s_i\mathbf{u}_i|| = s_i||\mathbf{u}_i|| = s_i$ 。

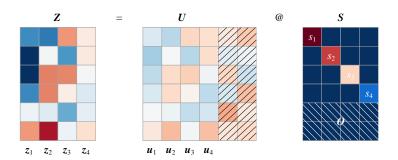


图 17. 第二条计算 Z 的路径

格拉姆矩阵

对 Z 求格拉姆矩阵:

$$\mathbf{Z}^{\mathsf{T}}\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_{1}^{\mathsf{T}} \\ \mathbf{z}_{2}^{\mathsf{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{z}_{D}^{\mathsf{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{z}_{1} & \mathbf{z}_{2} & \cdots & \mathbf{z}_{D} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{z}_{1}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{1} & \mathbf{z}_{1}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{2} & \cdots & \mathbf{z}_{1}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{D} \\ \mathbf{z}_{2}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{1} & \mathbf{z}_{2}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{2} & \cdots & \mathbf{z}_{2}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{z}_{D}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{1} & \mathbf{z}_{D}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{2} & \cdots & \mathbf{z}_{D}^{\mathsf{T}}\mathbf{z}_{D} \end{bmatrix}$$
(21)

请大家将上式写成向量内积形式。

将(19)代入得到(21):

$$\mathbf{Z}^{\mathrm{T}}\mathbf{Z} = (\mathbf{U}\mathbf{S})^{\mathrm{T}}\mathbf{U}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{\mathrm{T}}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U}\mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_{1}^{2} & & & \\ & s_{2}^{2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_{D}^{2} \end{bmatrix}$$
(22)

如图 18 所示,发现 Z 的格拉姆矩阵为对角阵,也就是说 Z 的列向量两两正交,即:

$$\boldsymbol{z}_{i}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_{j} = \boldsymbol{z}_{j}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z}_{i} = \boldsymbol{z}_{i} \cdot \boldsymbol{z}_{j} = \boldsymbol{z}_{j} \cdot \boldsymbol{z}_{i} = \left\langle \boldsymbol{z}_{i}, \boldsymbol{z}_{j} \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{z}_{j}, \boldsymbol{z}_{i} \right\rangle = 0, \quad i \neq j$$
(23)

回看图 16, $X \to Z$ 的过程就是**正交化** (orthogonalization)。也请大家回顾本书第 10 章相关内容,特别是"二次投影 + 层层叠加"。

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

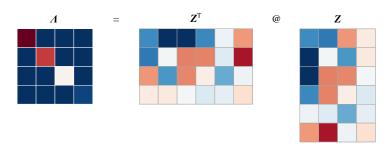


图 18. Z 的格拉姆矩阵



如下四幅图最能概括本章的核心内容。奇异值分解的四种不同类型都有特殊意义,都有不同 应用场合。

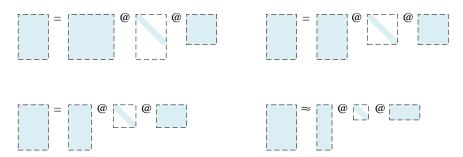


图 19. 总结本章重要内容的四幅图

再次强调,矩阵分解的内核还是矩阵乘法。相信大家已经在本章奇异值分解中看到矩阵乘法 的不同视角、分块矩阵乘法等数学工具的应用。此外,张量积和正交投影这两个工具在解释奇异 值分解上有立竿见影的效果。

本章留了个悬念, 奇异值分解中的奇异值的几何内涵到底是什么? 我们将在本书第 18 章回答这个问题。在那里, 大家会用优化视角一睹奇异值分解的几何本质。

本章虽然是矩阵分解板块的最后一章,但是本书有关矩阵分解的故事远没有结束。本书后续会从优化角度、数据角度、空间角度、应用角度一次次回顾这些线性代数的有力武器。

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