Wavelet Review

Canpei Hu

November 22, 2017

向量空间、张成、基底 1

向量空间 \mathbb{V} : ①对加法封闭: $\forall x, y \in \mathbb{V} \Rightarrow x + y \in \mathbb{V}$

(2)对数乘封闭: $\forall x \in \mathbb{V}, \forall \lambda \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda x \in \mathbb{V}$

线性组合: z = ax + by $x, y, z \in \mathbb{V}$; $a, b \in \mathbb{R}$

张成: $span\{v_1, v_2, \cdots, v_n\} = \{a_1v_1 + a_2v_2 + \cdots + a_nv_n | a_i \in \mathbb{R}; v_i \in \mathbb{V}\}$

基底: 空间中存在的最大线性无关向量组,即张成此空间所需的最小线性无关向量组

▼的子空间: 既是▼的子集,又是向量空间

正交、相关、傅里叶级数的基底 2

同一空间中的两个**向量**x,y正交,即是 $x^Ty = x \cdot y = 0$;

[a,b]区间上的两个**函数**f(x),g(x)正**交**,即是 $\int_a^b f(x)g(x)dx=0$.

以上定义引入**内积**概念: 向量x, y的内积定义为 $\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$; [a, b]区间上函数f(x), g(x)的内积定义为 $\int_a^b f(x)g(x)dx$. 相关亦由内积定义,内积的模越大,相关性越强。正交即是相关为0的特殊情况。

三角函数系 $\{1, cosx, sinx, cos2x, sin2x, \cdots, cosnx, sinnx\}$ 在基波 $\{cosx, sinx\}$ 的周期区间上正交,且每一 个基底与自身内积为1,它们是傅里叶级数空间的一组标准正交基(orthonormal basis). 基底选择三原则:

- ①正交(orthogonal):一组基底中的向量两两正交,实现计算时的解耦(decouple),并且最好是归一 化(normalized)的,称为标准正交基(orthonormal basis);
- ②系数紧凑(compact coefficients): 向量在少量基底上的投影系数大,而在绝大部分基底上的投影系 数小;
 - (3)特征包含:含有一个向量想要测量的性质。

矩阵4个子空间、正交补 3

A的**列空间** $\mathbb{C}(A)$: A的列向量张成的空间

 $m{A}$ 的零空间 $\mathbb{N}(m{A})$: 方程 $m{A}m{x}=0$ 的解空间 $m{A}^T$ 的列空间 $\mathbb{C}(m{A}^T)$: $m{A}^T$ 的列向量张成的空间

 \mathbf{A}^T 的零空间 $\mathbb{N}(\mathbf{A}^T)$: 方程 $\mathbf{A}^T \mathbf{x} = 0$ 的解空间

 \mathbb{V}_0 在 \mathbb{V} 中的**正交补**: $\{v \in \mathbb{V} | \forall v_0 \in \mathbb{V}_0 \Rightarrow v \cdot v_0 = 0\}$. 子空间的正交补也是子空间。

- ① A^T 的列空间是A的**行空间**,即A的行向量张成的空间
- (2) A^T 的零空间是A的左零空间,即方程xA = 0的解空间
- ③ $\mathbb{C}(\mathbf{A}) \perp \mathbb{N}(\mathbf{A}^T)$,二者互为正交补 ,即 $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}(\mathbf{A}), \forall \mathbf{y} \in \mathbb{N}(\mathbf{A}^T) \Rightarrow \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = 0$ ④ $\mathbb{C}(\mathbf{A}^T) \perp \mathbb{N}(\mathbf{A})$,二者互为正交补 ,即 $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}(\mathbf{A}^T), \forall \mathbf{y} \in \mathbb{N}(\mathbf{A}) \Rightarrow \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = 0$

4 一个向量用另一个向量近似

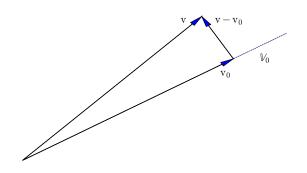


Figure 1: 一个向量用另一个向量近似

如图Fig1,用子空间 \mathbb{V}_0 中的 αv_0 来近似表达 \mathbb{V} 中的向量v. 要使得误差 $v - \alpha v_0$ 最小, 即是求

$$\boldsymbol{J} = \parallel \boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{v_0} \parallel^2$$

最小时的 α ,可用如下方法:

- ①J对 α 求导;
- ②用垂线最短:

$$(\boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{v_0}) \perp \boldsymbol{v_0} \Rightarrow (\boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{v_0}) \cdot \boldsymbol{v_0} = 0 \Rightarrow \alpha = \frac{\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v_0}}{\boldsymbol{v_0} \cdot \boldsymbol{v_0}}$$

5 一个向量用另一组向量近似、正交投影

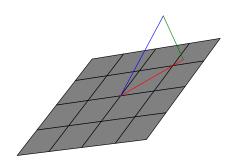


Figure 2: 一个向量用另一组向量近似

引入**正交投影**: 若 \mathbb{V}_0 是 \mathbb{V} 的子空间,则 \mathbb{V} 中向量 \mathbf{v} 在 \mathbb{V}_0 中的正交投影 $\mathbf{v_0}$ 满足: ① $\mathbf{v_0} \in \mathbb{V}_0$;② $\mathbf{v} - \mathbf{v_0}$ 与 \mathbb{V}_0 中所有向量都正交。

将前文中一个向量近似的情形推广到一组向量,以两个为例。

如图,用子空间 \mathbb{V}_0 的基底 v_1, v_2 来近似表达 \mathbb{V} 中的向量v, 使得误差 $v - \alpha v_1 - \beta v_2$ 最小,即是求

$$\boldsymbol{J} = \parallel \boldsymbol{v} - (\alpha \boldsymbol{v_1} + \beta \boldsymbol{v_2}) \parallel^2$$

最小时的 α , β .

- ①用高数方法求取到极值时的条件;
- (2)用正交投影:

$$(\boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{v_1} - \beta \boldsymbol{v_2}) \perp \mathbb{V}_0 \Rightarrow \begin{cases} (\boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{v_1} - \beta \boldsymbol{v_2}) \perp \boldsymbol{v_1} \\ (\boldsymbol{v} - \alpha \boldsymbol{v_1} - \beta \boldsymbol{v_2}) \perp \boldsymbol{v_2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v_1} = \alpha \boldsymbol{v_1} \cdot \boldsymbol{v_1} + \beta \boldsymbol{v_2} \cdot \boldsymbol{v_1} \\ \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v_2} = \alpha \boldsymbol{v_1} \cdot \boldsymbol{v_2} + \beta \boldsymbol{v_2} \cdot \boldsymbol{v_2} \end{cases}$$

二元一次,解出 α , β 即可。

6 最小二乘

最小二乘的求解思路即是用一组向量近似一个向量。 考虑含有两个特征的方程组:

$$\begin{cases} m_1 x_1^1 + n_1 x_1^2 + b_1 = y_1 \\ m_2 x_2^1 + n_2 x_2^2 + b_2 = y_2 \\ & \dots \\ m_k x_k^1 + n_k x_k^2 + b_k = y_k \end{cases}$$

写为向量形式 $m \cdot x^1 + n \cdot x^2 + b \cdot u = y$.

一般来说,这个方程组的变量维度远远高于特征数,不存在确切解。因此最小二乘的目的即是找一个方程,它能由这一组方程表示,使得表示误差最小。 这等价于找一点 $\mathbf{p}=m\mathbf{x^1}+n\mathbf{x^2}+b\mathbf{u}$,使得 \mathbf{p} 与 \mathbf{y} 误差最小。

由前文向量近似表达的思想, 做如下推导:

$$\begin{cases} (\mathbf{y} - \mathbf{p}) \perp & \mathbf{x}^{1} \\ (\mathbf{y} - \mathbf{p}) \perp & \mathbf{x}^{2} \Rightarrow \begin{cases} (\mathbf{y} - m\mathbf{x}^{1} - n\mathbf{x}^{2} - b\mathbf{u}) \cdot \mathbf{x}^{1} = & 0 \\ (\mathbf{y} - m\mathbf{x}^{1} - n\mathbf{x}^{2} - b\mathbf{u}) \cdot \mathbf{x}^{2} = & 0 \Rightarrow \\ (\mathbf{y} - m\mathbf{x}^{1} - n\mathbf{x}^{2} - b\mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} = & 0 \end{cases} \begin{cases} \mathbf{x}^{1} \cdot \mathbf{y} = m\mathbf{x}^{1} \cdot \mathbf{x}^{1} + n\mathbf{x}^{2} \cdot \mathbf{x}^{1} + b\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}^{1} \\ \mathbf{x}^{2} \cdot \mathbf{y} = m\mathbf{x}^{1} \cdot \mathbf{x}^{2} + n\mathbf{x}^{2} \cdot \mathbf{x}^{2} + b\mathbf{u} \cdot \mathbf{x}^{2} \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{y} = m\mathbf{x}^{1} \cdot \mathbf{u} + n\mathbf{x}^{2} \cdot \mathbf{u} + b\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \end{cases}$$

写为矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{x^{1T}y} = & m\boldsymbol{x^{1T}x^1} + n\boldsymbol{x^{2T}x^1} + b\boldsymbol{u^Tx^1} \\ \boldsymbol{x^{2T}y} = & m\boldsymbol{x^{1T}x^2} + n\boldsymbol{x^{2T}x^2} + b\boldsymbol{u^Tx^2} \\ \boldsymbol{u^Ty} = & m\boldsymbol{x^{1T}u} + n\boldsymbol{x^{2T}u} + b\boldsymbol{u^Tu} \end{bmatrix} \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x^{1T}} \\ \boldsymbol{x^{2T}} \\ \boldsymbol{u^T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x^1} & \boldsymbol{x^2} & \boldsymbol{u} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m \\ n \\ b \end{bmatrix}$$

$$\diamondsuit Z = \begin{bmatrix} x^1 & x^2 & u \end{bmatrix}$$
, 则有: $\begin{bmatrix} m \\ n \\ b \end{bmatrix} = (Z^T Z)^{-1} Z^T y$

这就是最小二乘法(Least Square Method,LSM)。

7 Haar小波的三种理解

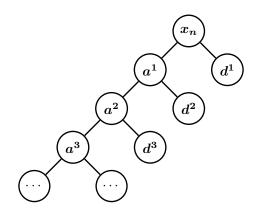


Figure 3: Haar小波分解

Fig3为小波每一层的分解图,不断分解a分量即可。

(I): 运算观点

给定序列(向量) $x_n = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}$,其中 $N = 2^m$ 是2的整数幂。 则 x_n 的一级Haar小波分解如下:

$$\boldsymbol{a^1} = \{\frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, \frac{x_3 + x_4}{\sqrt{2}}, \cdots, \frac{x_{N-1} + x_N}{\sqrt{2}}\}$$

$$d^{1} = \{\frac{x_{1} - x_{2}}{\sqrt{2}}, \frac{x_{3} - x_{4}}{\sqrt{2}}, \cdots, \frac{x_{N-1} - x_{N}}{\sqrt{2}}\}$$

注意其中 a^1 和 d^1 的长度(维度)为 $\frac{N}{2}$ 。 对 a^1 继续应用如上变换,得到

$$\boldsymbol{a^2} = \{\frac{a_1^1 + a_2^1}{\sqrt{2}}, \frac{a_3^1 + a_4^1}{\sqrt{2}}, \cdots, \frac{a_{\frac{N}{2} - 1}^1 + a_{\frac{N}{2}}^1}{\sqrt{2}}\} = \{\frac{x_1 + x_2 + x_3 + x_4}{2}, \frac{x_5 + x_6 + x_7 + x_8}{2}, \cdots\}$$

$$\boldsymbol{d^2} = \{\frac{a_1^1 - a_2^1}{\sqrt{2}}, \frac{a_3^1 - a_4^1}{\sqrt{2}}, \cdots, \frac{a_{\frac{N}{2} - 1}^1 - a_{\frac{N}{2}}^1}{\sqrt{2}}\} = \{\frac{x_1 + x_2 - x_3 - x_4}{2}, \frac{x_5 + x_6 - x_7 - x_8}{2}, \cdots\}$$

注意其中 a^2 和 d^2 的维度为 $\frac{N}{4}$,此即为 x_n 的二级Haar小波分解

更高阶的小波分解依此类推,不断对 a^i 分解,每次维度减半。

(2): 基底观点

定义N维向量空间 $\mathbb{U}^1, \mathbb{V}^1, \mathbb{U}^2, \mathbb{V}^2, \cdots$, 其中 \mathbb{U}^1 的基底为:

$$\boldsymbol{u_1^1} = [\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, 0, 0, \cdots]^T$$

$$\boldsymbol{u_2^1} = [0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, \cdots]^T$$

$$u_{\frac{N}{2}}^{1} = [0, 0, \cdots, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}]^{T}$$

 \mathbb{V}^1 的基底为:

$$\boldsymbol{v_1^1} = [\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, 0, 0, \cdots]^T$$

$$\boldsymbol{v_2^1} = [0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0, \cdots]^T$$

$$\boldsymbol{v}_{\frac{N}{2}}^{1} = [0, 0, \cdots, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}]^{T}$$

 \mathbb{U}^2 的基底为:

$$u_1^2 = \left[\frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots\right]^T$$

$$u_2^2 = \left[0, 0, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, 0, 0, 0, 0, \dots\right]^T$$
...

$$\boldsymbol{u}_{\frac{N}{4}}^{2} = [0, 0, 0, 0, \cdots, 0, 0, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}]^{T}$$

 \mathbb{V}^2 的基底为:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v_1^2} &= [\frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, -\frac{1}{\sqrt{4}}, -\frac{1}{\sqrt{4}}, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots]^T \\ \boldsymbol{v_2^2} &= [0, 0, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, -\frac{1}{\sqrt{4}}, -\frac{1}{\sqrt{4}}, 0, 0, 0, 0, \dots]^T \\ & \dots \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{v}_{\frac{N}{4}}^{\mathbf{2}} = [0, 0, 0, 0, \cdots, 0, 0, 0, 0, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, -\frac{1}{\sqrt{4}}, -\frac{1}{\sqrt{4}}]^T$$

更高阶依此类推,每个基底的**支撑(support)**数量按2的指数递增,空间的基底数量按2的指数递减。注意这些向量都是N维的。

 $\mathbb{U}^1,\mathbb{V}^1$ 是一对正交补,所有向量 $\{u_i^1,v_i^1\}$ 构成 \mathbb{R}^N 的一组单位正交基。 同理, $\mathbb{U}^2,\mathbb{V}^2$ 是一对正交补,所有向量 $\{u_i^2,v_i^2\}$ 构成 $span\{u_i^1\}$ 的一组单位正交基。 在这个基础上,构建**尺度分量**a和**小波分量**d

$$egin{aligned} a^1 &= egin{bmatrix} x \cdot u_1^1 & x \cdot u_2^1 & \cdots & x \cdot u_{rac{N}{2}}^1 \end{bmatrix}^T \ d^1 &= egin{bmatrix} x \cdot v_1^1 & x \cdot v_2^1 & \cdots & x \cdot v_{rac{N}{2}}^1 \end{bmatrix}^T \ a^2 &= egin{bmatrix} x \cdot u_1^2 & x \cdot u_2^2 & \cdots & x \cdot u_{rac{N}{4}}^2 \end{bmatrix}^T \ d^2 &= egin{bmatrix} x \cdot v_1^2 & x \cdot v_2^2 & \cdots & x \cdot v_{rac{N}{4}}^2 \end{bmatrix}^T \end{aligned}$$

这样,就在向量空间的基础上理解了小波分解。

③:图像观点

将序列下标改为连续变量,作图如下:

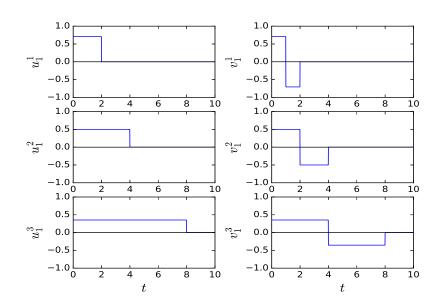


Figure 4: Haar小波基

从前文可以看出, u_1^1 向右平移2得到 u_2^1 , u_1^1 向右平移4得到 u_3^1 ; u_1^2 向右平移4得到 u_2^2 , u_1^2 向右平移8得

到 u_3^2 ,其余规律以此类推。 上面连续形式的 u_j^i,v_j^i 构成一组小波基,对于任何均方收敛的函数,都可以表示为若干小波基的线性组 合, 即若干小波基波形的叠加。

二维Haar小波基 8

前面已经引入连续形式的一级小波基,这里介绍尺度函数和小波函数,仅讨论一级分解(实际上二级分解 即是取一级分解得到的尺度分量继续分解)。

尺度函数(父小波)即是前文中的 $m{u}_{j}^{i}$,用来描述小波变换的尺度,连续情形下记作函数 $\phi(x)$

小波函数(母小波)即是前文中的 v_{j}^{i} ,用来描述该尺度下的小波变换,连续情形下记作函数 $\psi(x)$

二维情形下,只有两个一维尺度函数相乘才能得到二维尺度函数,即

$$\phi(x,y) = \phi(x)\phi(y)$$

而其他三种乘积均得到不同方向上的二维小波函数

$$\psi^{1}(x,y) = \phi(x)\psi(y), \quad \psi^{2}(x,y) = \psi(x)\phi(y), \quad \psi^{3}(x,y) = \psi(x)\psi(y)$$

将其写为离散形式并忽略所有零元素(实际上得到的矩阵是稀疏的,这里我只取非零元): 尺度函数(水平父、垂直父)(LL):

$$\phi(x,y) = \phi(x)\phi(y) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

水平小波函数(水平母、垂直父)(HL):

$$\psi^{1}(x,y) = \phi(x)\psi(y) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

垂直小波函数(水平父、垂直母)(LH):

$$\psi^{2}(x,y) = \psi(x)\phi(y) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

对角小波函数(水平母、垂直母)(HH):

$$\psi^{3}(x,y) = \psi(x)\psi(y) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

一般来说,对图像(矩阵)做Haar分解:LL保留原图像的主要内容,HL保留水平方向的高频信息,LH保 留竖直方向的高频信息、HH保持对角线方向的高频信息。

9 FT、STFT、WT的关系

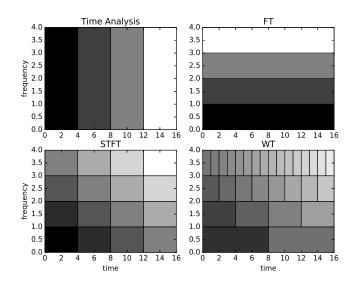


Figure 5: FT,STFT,WT的关系

在**时域分析(Time Analysis)**中无法得到频域信息,而**傅里叶变换(Fourier Transform)**无法得到时域信息(如图中上面两幅图,左图只具备时间分辨率,右图只具备频率分辨率)。基于这两种方法的局限性,后来提出了**短时傅里叶变换(Short-Time Fourier Transform)**和**小波变换(Wavelet Transform)**.

STFT是将时间轴分段,每一段上分别进行FT,这样做得到的时频域分辨率如左下图。然而由时间和频率的不确定性原理,更低的频率需要更长的时间块来描述,而一旦时间块变长,对于较高频率而言STFT的意义也就不存在。这就产生了一对矛盾。

WT也是将时间轴分段,但与STFT不同的是,WT是非均匀分段,在较高频率处使用小的时间块刻画,在较低频率处使用大的时间块刻画,进行了一定程度上的折中。这一良好性质的理论基础是各级小波分解中的尺度函数。

不过需注意小波仍然没有克服时间和频率的不确定性,克服这一不确定性的变换有**希尔伯特-黄变换(HHT)**等。

10 WT的应用

- ①图像去噪、压缩(指纹图片压缩、JPEG2000编码): 舍弃高频成分,保留尺度分量。压缩比高,速度快,信息丢失少,传输过程抗干扰;
- ②数值计算:存在快速变换方法(滤波器组实现),对N点序列的时间复杂度为O(N),可用于计算傅里叶变换等;
 - (3)多分辨率处理、压缩感知;
 - ④信号的时频分析;
 - (<u>5</u>).....

11 SVD分解、PCA

回顾**特征值分解(Eigen Value Decompostion,EVD)**: 若对于矩阵A和向量x、标量 λ , 有 $Ax = \lambda x$, 则称x为A的特征向量, λ 为A的特征值(Eigen Value). 特征向量的含义是,该向量x在该变换A下的结果方向不变,尺度变为原来的 λ 倍。

将特征向量排成一个矩阵的列,记作P;将相应的特征值写为对角阵,记作 Λ ,则有 $A = P\Lambda P^{-1}$.对于实对称阵A,所有特征向量组成一组正交基,即排成正交阵P,使得 $A = P\Lambda P^{-1} = P\Lambda P^{T}$.

但是EVD的局限性在于,只有方阵才能做EVD,而实际使用的矩阵(如最小二乘的系数矩阵)往往不是方阵。因此提出问题: 对任意的 $m \times n$ 矩阵 $A_{m \times n}$,能否找到n维空间中的一组正交基,使其经过A变换后,成为m维空间中的一组正交基?

对任意 $m \times n$ 矩阵 $A_{m \times n}$, $A^T A$ 是 $n \times n$ 实对称阵, 因而其特征向量是n维空间的一组正交基,记为 $\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$, 则A将其映射为 $\{Av_1, Av_2, \cdots, Av_n\}$ 。 由于 $\{v\}$ 本身正交,有 $v_i^T v_i = 0$, 且

$$(Av_i)^T Av_j = v_i^T A^T Av_j = v_i^T \lambda_j v_j = \lambda_j v_i^T v_j = 0$$

这样,就找到了经过A映射后仍然正交的一组向量,现在将映射后的正交向量单位化。由于

$$\parallel Av_j \parallel^2 = (Av_j)^T Av_j = v_j^T A^T Av_j = \lambda_j$$

故对于 $\lambda_i \neq 0$ 取

$$oldsymbol{u_j} = rac{oldsymbol{Av_j}}{\parallel oldsymbol{Av_j} \parallel} = rac{1}{\sqrt{\lambda_j}} oldsymbol{Av_j}$$

 $令 r = rank(\mathbf{A}), \sigma_i = \sqrt{\lambda_i}, 0 \le i \le r$, 上式变为

$$u_i = \frac{1}{\sigma_i} A v_i$$

由于矩阵的 rank 只有 r ,故对应 $\lambda \neq 0$ 的特征向量 \boldsymbol{v} 只有 r 个(对应 $\lambda = 0$ 的 $\operatorname{n-r}$ 个是零空间 $\mathbb{N}(\boldsymbol{A^TA})$ 的正交基,即 $\boldsymbol{A^TAv_j} = 0$),因此对应的 \boldsymbol{u} 只有 r 个, 即 $\{\boldsymbol{u_1},\boldsymbol{u_2},\cdots,\boldsymbol{u_r}\}$. 因此需要补充向量 $\{\boldsymbol{u_{r+1}},\boldsymbol{u_{r+2}},\cdots,\boldsymbol{u_m}\}$ 使 $\{\boldsymbol{u_i}\}$ 成为 \mathbb{R}^m 空间的正交基。

在 $\mathbb{N}(A^TA)$ 中选取 $\{v_{r+1}, v_{r+2}, \cdots, v_n\}$ 使其同时是 $\mathbb{N}(A)$ 的正交基,并令 $\sigma_i = 0, r < i \le m$. 这样做的可行性是:若v满足Av = 0,则必满足 $A^TAv = 0$.

这样,就得到了 $\{v_1, v_2, \cdots, v_r, v_{r+1}, \cdots, v_n\}, \{u_1, u_2, \cdots, u_r, u_{r+1}, \cdots, u_m\}$,使得

$$\mathbf{A} \begin{bmatrix} \mathbf{v_1} & \mathbf{v_2} & \cdots & \mathbf{v_r} & \mathbf{v_{r+1}} & \cdots & \mathbf{v_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{u_1} & \mathbf{u_2} & \cdots & \mathbf{u_r} & \mathbf{u_{r+1}} & \cdots & \mathbf{u_m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ & \ddots & & 0 \\ & & & \sigma_r \\ & & & & 0 \end{bmatrix}$$

上式记作 $AV = U\Sigma$, 即

$$egin{aligned} egin{aligned} egi$$

这就是A的**奇异值分解(Singular Value Decomposition,SVD)**。 其中,U是 $m \times m$ 正交阵,V是 $n \times n$ 正交阵, Σ 是 $m \times n$ 对角阵。 u_i 是 AA^T 的特征向量,称为A的左**奇异向量**; v_i 是 A^TA 的特征向量,称为A的右**奇异向量**; σ_i 是 A^TA 的特征值开方,称为A的**奇异值**。 奇异值为0表明对应的维度缺少信息,奇异值越大表明对应维度容纳的信息方差越大,即信息量越大。

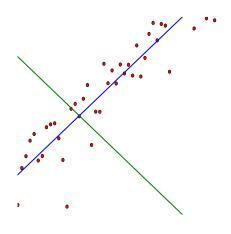


Figure 6: PCA:最大重构与最大可分

主成分分析(Principal Component Analysis,PCA): 寻找一个超平面,使其具有两个很好的性质:

- ①最大重构性: 样本点到这个超平面的距离足够近(近似误差小); ②最大可分性: 样本点在超平面的投影尽可能分散(投影方差大)。

对Fig6中的点,蓝色直线即是PCA所求的超平面,绿色直线是该超平面的正交。最大重构性表明点到蓝 色直线的距离之和最近, 即到绿色直线的正交投影之和最小; 最大可分性表明点到蓝色直线的正交投影之和 最大, 即到绿色直线的距离之和最大。

PCA的一种实现手段即是SVD, 取出最大奇异值, 它对应的维度容纳信息量最大, 即是主成分。

- SVD作为线性代数理论的集大成者,有诸多应用:
- ①求矩阵的四个子空间;
- ②数值计算:判断方程是否有解,并求近似解(回归);
- ③压缩去噪:取少量较大奇异值,便可得到大部分信息;
- ④向量组的模式识别(Pattern Recognition): 取最大奇异值;
- ⑤潜在语义索引(Latent Semantic Indexing,LSI): 取较大奇异值,每个对应一种语义
- (6)....